

**SHAROF RASHIDOV NOMIDAGI SAMARQAND DAVLAT
UNIVERSITETI HUZURIDAGI ILMIY DARAJALAR BERUVCHI
PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

O‘ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI

ALLAQULIYEVA SHAHLOXON HAKIMBOY QIZI

**KONDENSIRLANGAN MUHITLARDAGI RELAKSATSION
JARAYONLAR VA ULARNI YORUG‘LIKNING KOMBINATSION
SOCHILISH SPEKTRIDA NAMOYON BO‘LISHI**

01.04.05 – Optika

**Fizika-matematika fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi
AVTOREFERATI**

Samarqand– 2024

**Fizika-matematika fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD)
dissertatsiyasi avtoreferati mundarijasi**

**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD)
по физико-математическим наукам**

**Content of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD)
on physical-mathematical sciences**

Allaquliyeva Shahloxon Hakimboy qizi

Kondensirlangan muhitlardagi relaksatsion jarayonlar va ularni yorug‘likning kombinatsion sochilish spektrida namoyon bo‘lishi..... 3

Аллакулиева Шахлохон Хакимбой кизи

Релаксационные процессы в конденсированных средах и их проявление в спектре комбинационного рассеяния света..... 21

Allakulieva Shakhloxon Khakimbay qizi

Relaxation processes in condensed matters and their manifestation in the spectrum of combination light scattering..... 39

E‘lon qilingan ishlar ro‘uxati

Список опубликованных работ

List of published works 43

**SHAROF RASHIDOV NOMIDAGI SAMARQAND DAVLAT
UNIVERSITETI HUZURIDAGI ILMIY DARAJALAR BERUVCHI
PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

O‘ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI

ALLAQULIYEVA SHAHLOXON HAKIMBOY QIZI

**KONDENSIRLANGAN MUHITLARDAGI RELAKSATSION
JARAYONLAR VA ULARNI YORUG‘LIKNING KOMBINATSION
SOCHILISH SPEKTRIDA NAMOYON BO‘LISHI**

01.04.05 – Optika

**Fizika-matematika fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi
AVTOREFERATI**

Samarqand– 2024

Falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O‘zbekiston Respublikasi Oliy ta’lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida B2022.2.PhD/FM722 raqam bilan ro‘yxatga olingan.

Dissertatsiya Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universitetida bajarilgan.
Dissertatsiya avtoreferati uch tilda (o‘zbek, rus, ingliz (rezyume)) Ilmiy kengashning veb-sahifasida (www.samdu.uz) va «Ziyonet» Axborot ta’lim portalida (www.ziyonet.uz) joylashtirilgan.

Ilmiy rahbar:	Otajonov Shavkat fizika-matematika fanlari doktori, professor
Rasmiy opponentlar:	Xushvaqtov Hakim Abdulhaqovich fizika-matematika fanlari doktori, professor Raxmatullayev Ilyos Arzimurodovich fizika-matematika fanlari doktori, dotsent
Yetakchi tashkilot:	U.A.Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari instituti

Dissertatsiya himoyasi Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti huzuridagi PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 raqamli Ilmiy kengashning 2024-yil «__» _____ soat ____dagi majlisida bo‘lib o‘tadi. (Manzil: 140104, Samarqand shahri, Universitet xiyoboni, 15-uy. Tel.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; faks: (99866) 239-11-40; e-mail: rektor@samdu.uz Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti Muhandislik fizikasi instituti, 1-qavat, 114-xona).

Dissertatsiya bilan Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universitetining Axborot-resurs markazida tanishish mumkin (____ raqami bilan ro‘yxatga olingan). (Manzil: 140104, Samarqand shahri, Universitet xiyoboni, 15-uy. Tel.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; faks: (99866) 239-11-40).

Dissertatsiya avtoreferati 2024-yil «__» _____ kuni tarqatildi.
(2024-yil «__» _____ dagi _____ raqamli reyestr bayonnomasi).

M.X.Ashurov
Ilmiy darajalar beruvchi
ilmiy kengash raisi,
f.-m.f.d., akademik

R.M.Rajabov
Ilmiy darajalar beruvchi
ilmiy kengash ilmiy kotibi,
f.-m.f.n., dotsent

D.I.Semenov
Ilmiy darajalar beruvchi
ilmiy kengash huzuridagi
Ilmiy seminar raisi,
f.-m.f.d., dotsent

KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi annotatsiyasi)

Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati. Bugungi kunda dunyo miqyosida olib borilayotgan keng ko‘lamli nazariy hamda ilmiy-amaliy tadqiqotlar moddalarning uch agregat holatlaridagi kuchli molekulararo ta’sirlashuv kuchlarini (gazlar bundan mustasno) va ularda sodir bo‘ladigan fizik jarayonlarning namoyon bo‘lish qonuniyatlarini o‘rganish dolzarb muammolardan biri ekanligini ko‘rsatmoqda. Ayniqsa, kondensirlangan muhitlardagi molekulararo ta’sirlashuv kuchlarini tabiatini tadqiq qilish va optik spektrlarga ta’sirini aniqlash fundamental va amaliy ahamiyatga ega bo‘lib, zamonaviy spektroskopiya sohasining asosiy yo‘nalishlaridan hisoblanadi.

Mavjud adabiyotlarda bir qator eksperimental tadqiqotlar hamda chegaralangan nazariyalar mavjud bo‘lishiga qaramasdan molekulyar optika sohasidagi ko‘plab muammolar o‘zining yechimini topmagan. Shuning uchun ham oxirgi yillarda yildan yilga molekulararo ta’sirlashuv qonuniyatlarini optik spektrlarga ta’sirini o‘rganishga tegishli ilmiy tadqiqotlar soni ortib bormoqda.

Ushbu sohaga tegishli mavjud ilmiy adabiyotlardagi tadqiqot ishlari aksariat hollarda strukturasi sodda ko‘rinishdagi suyuqliklarda o‘rganilgan bo‘lib, ko‘p atomli murakkab strukturaga ega bo‘lgan moddalardagi tadqiqotlar soni hamda yaratilayotgan nazariyalarni qo‘llanish imkoniyatlari ham chegaralangan. Tajriba natijalarida ham tafovutlar mavjud bo‘lib, chuqur tahlil qilishga muxtoj ekanligi, aniq maqsadga yo‘naltirilgan eksperimental tadqiqotlar o‘tkazish va mukammal molekulyar nazariyalar yaratishni taqozo etadi.

Alohida ta’kidlash lozimki, mustaqillik yillarida, ayniqsa keyingi yetti yil ichida fundamental va amaliy ahamiyatga ega bo‘lgan dolzarb ilmiy yo‘nalishlarni har tomonlama qo‘llab quvvatlashga e’tibor kuchaytirildi. Kondensirlangan muhitlarning strukturasi, molekulyar tuzilishini, molekulararning tarkibidagi atomlarning elektromagnit to‘lqin nurlanishi ta’siridagi tebranish qonuniyatlari bilan bog‘liq bo‘lgan optik spektrlar yordamida o‘rganish sanoat uchun zarur bo‘lgan yangi moddalarni sintez qilish to‘g‘risida ilmiy asoslangan tavsiyalar berish muhim ahamiyatga ega.

Ushbu dissertatsiya ishi O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2019-yil 17-iyundagi PQ – 4358-son “2019-2023 yillarda Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universitetida talab yuqori bo‘lgan malakali kadrlar tayyorlash tizimini tubdan takomillashtirish va ilmiy salohiyatni rivojlantirish chora-tadbirlari to‘g‘risida” gi Qarori, 2021-yil 19-martdagi PQ – 5032-son “Fizika sohasidagi ta’lim sifatini oshirish va ilmiy tadqiqotlarni rivojlantirish chora-tadbirlari to‘g‘risida” gi Qarori, 2017-yil 17-fevraldagi PQ – 2789-son “Fanlar akademiyasi faoliyati, ilmiy-tadqiqot ishlarini tashkil etish, boshqarish va moliyalashtirishni yanada takomillashtirish chora-tadbirlari to‘g‘risida” gi Qarorlarida va 2023-yil 11-sentyabrdagi PF-158-son “O‘zbekiston – 2030 strategiyasi to‘g‘risida” gi Farmoni hamda mazkur faoliyatga oid boshqa me’yoriy-huquqiy hujjatlarda belgilangan vazifalarni amalga oshirishda ushbu dissertatsiya tadqiqoti muayyan darajada xizmat qiladi.

Tadqiqotning respublika fan va texnologiyalari rivojlanishining ustuvor yoʻnalishlariga mosligi. Mazkur tadqiqot ishi Respublika fan va texnologiyalar rivojlanishining II. “Fizika, astronomiya, energetika va mashinasozlik” ustuvor yoʻnalishi doirasida bajarilgan.

Muammoning oʻrganilganlik darajasi. Suyuq moddalarning xossalarni spektroskopik usul bilan oʻrganishga xorijiy mamlakatlarning olimlari Katarzyna Z. Gaca-Zajac, Benjamin R. Smith, Alison Nordon, Ashleigh J. Fletcher, Karen Johnston, Jan Sefcik (Angliya) tomonidan formaldegid-suv-metanol tizimlarida gidratlangan bogʻlanishlarni hosil boʻlish qonuniyatlari IQ va Raman spektroskopiyasi usullari bilan oʻrganilgan. Zhang Li-Qun, Li Hao-Ran (Xitoy) larning tadqiqot ishlarida IQ va Raman spektroskopik usullar yordamida ionli suyuqliklar va ionli aralashmalarning strukturaviy xossalarni oʻrganishga qoʻllash, nazariy hisob-kitoblar va kompyuterda modellashtirishga asoslangan holda tahlil qilingan. P. Lalanne, T. Tassaing, Y. Danten, M. Besnard (Fransiya) etanol molekulasidagi vodorod bogʻlanishining Raman va infraqizil spektrlari $3500-3700\text{ cm}^{-1}$ chastotalar oraligʻida oʻrganilgan. Yuichi Takasu, Satoru Matsumoto, Yasuhiro Fujii, Izumi Nishio (Yaponiya) lar tomonidan tetragidrofuran molekulasining harakat qonuniyatlari Raman spektri yordamida tahlil qilingan. Dake Wang, Kathryn Mittauer, Nicholas Reynolds (AQSH) tadqiqotlari uglerod disulfidida Raman sochilish spektri oʻrganilgan boʻlib, stoks va antistoks tashkil etuvchilarining intensivliklarni nisbati molekularning tebranish energiyasi darajasiga bogʻliqligi oʻrganilgan. MDH mamlakatlaridan V.S. Gorelik (Rossiya), V.Ye. Pogorelov, I.Yu. Doroshenko, L.A. Bulavin (Ukraina), V.M. Korovina (Tojikiston), L.M. Sabirov, U.N. Tashkenbayev, A. Jumabayev, H. Xushvaqtoʻv, A. Absanov, B. Quyliyev, Sh. Otajonov, B. Eshchanov, M. Alijonov (Oʻzbekiston) va boshqalar ilmiy tadqiqot ishlari olib borishgan.

Ilmiy tadqiqotlar natijasida spektroskopik usul bilan turli koʻrinishga ega boʻlgan kondensirlangan muhit molekulari orasidagi oʻzaro taʼsirlashuv kuchlarining qonuniyatlari oʻrganilib, relaksatsion jarayonlarga tegishli ayrim fizik parametrlar aniqlangan. Jumladan, H-bogʻlanishning ayrim qonuniyatlari, molekularlardagi klasterlanish hodisasi oʻrganilgan. Olingan natijalar mavjud nazariyalar bilan solishtirilib, tegishli xulosalar chiqarilgan. Bugungi kunda optik spektrlar yordamida relaksatsion jarayonlarning qonuniyatlarini namoyon boʻlish mexanizmlarini oʻrganish boʻyicha tadqiqotlar olib borish davom etmoqda.

Tadqiqotning dissertatsiya bajarilgan oliy taʼlim muassasasining ilmiy-tadqiqot ishlari rejaları bilan bogʻliqligi. Dissertatsiya tadqiqoti Oʻzbekiston Milliy universiteti, Samarqand davlat universiteti hamda Kiyev milliy universitetlari bilan oʻzaro hamkorlikdagi FZ-20200929385 “Biologik ob’ektlarning nanooʻlchamli molekulyar klasterlarini oʻrganish va tatbiq qilishning spektroskopik hamda noempirik tahlil usullarini ishlab chiqish” mavzusidagi (2022-2027-yy.) davlat ilmiy-texnika dasturlari doirasidagi fundamental loyiha hamda Mirzo Ulugʻbek nomidagi Oʻzbekiston Milliy universiteti ilmiy tadqiqot ishlarining “Kondensirlangan muhitlardagi relaksatsion jarayonlarni spektroskopik usullar bilan tadqiq qilish” ochiq rejaları doirasida bajarilgan.

Tadqiqotning maqsadi. Lazer nurlanishi taʼsirida qutblanuvchanlik tenzori boʻyicha simmetrik va asimmetrik boʻlgan koʻp atomli uglevodorodlar

molekulalarining tebranma va aylanma harakati bilan bog‘liq bo‘lgan relaksatsion jarayonlar qonuniyatlarini optik spektrlar yordamida tadqiq qilishdan iborat.

Tadqiqotning vazifalari:

molekulalarning strukturasi tarkibidagi atomlarning o‘rniga alohida e‘tibor berish. Jumladan, kam atomli molekulalardan ko‘p atomli murakkab strukturaga ega bo‘lgan uglevodorodlarda mantiqan ketma-ketlikda tadqiqot olib borish;

chastotaning $0-3500 \text{ sm}^{-1}$ oralig‘ida spektroskopik usul bilan aniqlangan optik spektrlarning namoyon bo‘lish qonuniyatlariga benzol halqasiga (strukturasi) kiritilgan turli xil atomlarning harakati bilan bog‘liq jarayonlarni o‘rganish;

muayyan chastotalar oralig‘iga to‘g‘ri keluvchi optik spektrlarning namoyon bo‘lish mexanizmlarini va ularning ulushlarini aniqlash;

kvant-kimyoviy hisoblashlar asosida molekulalarning strukturaviy modelini yaratish;

H-bog‘lanishga ega bo‘lgan molekulalardagi vodorod bog‘lanishning qonuniyatlarini tadqiq qilish;

molekulalarning energetik sathlardagi relaksatsion jarayonlar qonuniyatlarini tahlili asosida molekulyar parametrlarni aniqlash.

Tadqiqotning ob‘ekti sifatida strukturasi oddiydan murakkab ko‘rinishga o‘tib boruvchi 7 ta uglevodorodlardan tashkil topgan molekulalar tanlab olingan.

Tadqiqotning predmeti qutblanuvchanlik tenzori bo‘yicha simmetrik va asimmetrik bo‘lgan molekulalarning xossalari, energetik sathlardagi yutilish va nurlanish jarayonlarini tabiati, molekulalararo ta’sirlashuv qonuniyatlarini optik spektrlarga ta’sirini o‘rganishdan iborat.

Tadqiqotning usullari. Dissertatsiyada yorug‘likning kombinatsion sochilish hamda infraqizil spektroskopiya, kvant-kimyoviy modellashtirish usullari qo‘llanilgan.

Tadqiqotning ilmiy yangiligi quyidagilardan iborat:

elektromagnit to‘lqin nurlanishi ta’sirida molekulalarning o‘zaro ta’sirlashuvi bilan bog‘liq bo‘lgan H-bog‘lanishning yashash vaqtini aniqlash metodikasi ishlab chiqildi;

ilk bor H-bog‘lanishning yashash vaqti kombinatsion sochilish spektri asosida hisoblanib, molekulaning tebranish chastotasi oshib borishi bilan ushbu bog‘lanishning yashash vaqti kamayishi aniqlandi;

kvant-kimyoviy hisoblashlar olib borilib, molekulalarning strukturaviy modeli yaratildi va atomlarning bog‘lanish uzunliklari, ular orasidagi burchaklarni aniqlash bo‘yicha amaliy tavsiyalar berildi;

ilk bor tajribadan olingan yorug‘likning kombinatsion sochilish spektri bilan infraqizil spektrlarni taqqoslash asosida molekulalarning qutblanuvchanlik tenzori yoki dipol momentining o‘zgarishini natijalovchi spektrdagi ulushi aniqlandi;

benzol strukturasi kiritilgan turli xil atomlarning tebranish qonuniyatlarini yorug‘likning kombinatsion sochilish hamda infraqizil yutilish spektrlarini namoyon bo‘lishiga ta’siri o‘rganilib, o‘zaro yaqin joylashgan atomlardan tashkil topgan molekulalarning harakati bilan bog‘liq spektrlarning namoyon bo‘lishi deformatsion tebranishlar bilan bog‘liqligi aniqlandi;

yorug'likning kombinatsion sochilish hamda infraqizil yutilish spektrlarining namoyon bo'lishi qaysi turdagi tebranishlar bilan bog'liqlik qonuniyatlari ishlab chiqildi.

Tadqiqotning amaliy natijasi quyidagilardan iborat:

yorug'likning kombinatsion sochilish spektri yordamida H-bog'lanishning yashash vaqtini hisoblash usuli ishlab chiqilgan bo'lib, barcha C=O, O-H va boshqa atomlarning o'zaro bog'lanish qonuniyatlarini tahlil qilishiga tatbiq qilish mumkin;

tajribada olingan yorug'likning kombinatsion sochilish spektrini tahliliga asoslanib, geologiya sohasida namunalardagi elementlar tarkibini va ularning miqdorini aniqlashda, farmakologiya sohasida dorilar tarkibini aniqlashda, kriminalistikada jinoyat sodir etgan shaxsni aniqlashda (qon tarkibining spektri yordamida) foydalanish mumkin;

yorug'likning kombinatsion sochilish spektrini tahlili asosida amaliyot uchun kerak bo'ladigan yangi kimyoviy moddalarni sintez qilish bo'yicha tavsiyalar berish mumkin.

Tadqiqot natijalarining ishonchliligi zamonaviy eksperimental qurilma hisoblangan InViaRaman spektrometri hamda Spectrum Two FT-IR spektrometrlardan foydalanilganligi, Respublika va xalqaro ilmiy-amaliy anjuman materiallari, OAK ro'yxatiga kiritilgan va boshqa xorijiy ilmiy jurnallarda chop etilgan maqolalar (Scopus va Web of Science), xulosa va tavsiyalarni vakolatli tashkilotlar tomonidan tasdiqlanganligi bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati. Tadqiqot natijalarining ilmiy ahamiyati elektromagnit to'lqin nurlanishi ta'sirida quyi energetik sathdagi molekularning yuqori energetik sathga ko'tarilishidagi yutilish va quyi energetik sathga qaytib tushish vaqtidagi o'z-o'zidan hamda majburiy nurlanish bilan bog'liq bo'lgan relaksatsion jarayonlarning qonuniyatlarini nazariy va tajriba yordamida tadqiq qilish imkoniyatini yaratadi. Shuningdek, molekulararo ta'sirlashuv jarayoni bilan bog'liq bo'lgan bir qator fizik parametrlarni aniqlash bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarining amaliy ahamiyati ko'p atomli uglevodorodlarning strukturasi yengil va og'ir atomlar (O, H, Cl, N) kiritilganda molekularidagi strukturaviy o'zgarishlarni yorug'likning kombinatsion sochilish va infraqizil spektrlariga ta'sirini aniqlash, relaksatsion jarayonlarning qonuniyatlarini ifodalovchi molekulyar nazariyalar ishlab chiqishga xizmat qiladi.

Tadqiqot ob'ektlari kvant-kimyoviy hisoblashlarga asoslangan molekular tarkibidagi atomlarning bog'lanish uzunliklari, ular orasidagi burchaklarning tahlili asosida maqsadli parametrlarga ega bo'lgan kimyoviy moddalarni sintez qilish imkoniyatini yaratadi.

Tadqiqot natijalarining amaliyotga joriy qilinishi. Tadqiqot ob'ekti sifatida tanlangan uglevodorodlardagi molekularning tebranma harakati bilan bog'liq relaksatsion jarayonlarning qonuniyatlarini tadqiq qilish bo'yicha olingan ilmiy natijalar asosida:

yorug'likning kombinatsion sochilish va infraqizil spektrlarini o'zaro taqqoslash natijasidagi molekularning qutblanuvchanlik tenzori hamda dipol momentining o'zgarishi bilan bog'liq ilmiy natijalar REP-04032022-206 raqamli "Optoelektron tarmoqlarda optik garmonika paydo bo'lishi va soliton tarqalishi

jarayonlarini boshqarish” (2022-2024-yy.) mavzusidagi xalqaro ilmiy loyihada past o‘lchamli optik materiallarda optik solitonlar tarqalishi modellarini, shuningdek, o‘rta infraqizil lazer nurlanishining chastotasini metall nanostrukturali plyonkalarda optik garmonikaga aylantirishning eksperimental usullarini ishlab chiqishda foydalanilgan (Chirchiq davlat pedagogika universitetining 2024-yil 5-fevraldagi 01/261-son ma’lumotnomasi);

tajriba va nazariy hisoblashlarga asoslangan atomlar orasidagi H-bog‘lanish qonuniyatlari hamda ushbu bog‘lanishning yashash vaqtini aniqlash natijalari FZ-20200929385 raqamli “Biologik ob’ektlarning nanoo‘lchamli molekulyar klasterlarini o‘rganish va tatbiq qilishning spektroskopik hamda noempirik tahlil usullarini ishlab chiqish” (2022-2027-yy.) mavzusidagi davlat ilmiy-texnika dasturidagi fundamental loyihada molekulyar klasterlanish jarayonlarining mexanizmlarini aniqlash imkonini bergan (Sh.Rashidov nomidagi Samarqand davlat universitetining 2024-yil 15-maydagi 10-2254-son ma’lumotnomasi);

tadqiqot natijalari Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universiteti Fizika fakulteti Fotonika kafedrasidagi 70530901 – Fizika (yo‘nalishlar bo‘yicha) magistratura mutaxassisligi talabalari uchun “Molekulyar optikaning klassik va zamonaviy asoslari” maxsus kursining ishchi o‘quv dasturi va kalendar rejasida aks ettirilgan bo‘lib, yorug‘likning kombinatsion sochilish va infraqizil spektrlarining namoyon bo‘lishida molekulaning qutblanuvchanlik tenzori va dipol momentlarining o‘zgarishi bilan bog‘liq qonuniyatlar, energetik sathlardagi relaksatsion jarayonlarning asosiy molekulyar parametrlarini aniqlash metodikasini ishlab chiqilganligi va boshqa qonuniyatlar o‘quv mashg‘ulotlarini zamonaviy eksperimental va nazariy hisoblangan natijalar bilan boyitilganligiga xizmat qilgan (Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universitetining 2024-yil 23-maydagi 04/11-4483-son ma’lumotnomasi);

Tadqiqot natijalarining aprobsiyasi. Dissertatsiyaning tadqiqot natijalari 5 ta xalqaro va 5 ta Respublika ilmiy-amaliy konferensiyalarda muhokamadan o‘tkazilgan.

Tadqiqot natijalarining e‘lon qilinganligi. Tadqiqot mavzusi bo‘yicha jami 15 ta ilmiy ish, jumladan, O‘zbekiston Respublikasi Oliy attestatsiya komissiyasining falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasining asosiy ilmiy natijalarini chop etish uchun tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda 5 ta maqola (2 tasi Respublika miqyosidagi, 2 tasi Scopus ma’lumotlar bazasidagi va 1 tasi xalqaro Web of Science jurnallarda) chop etilgan.

Dissertatsiyaning tuzilishi va hajmi. Dissertatsiya tarkibi kirish, to‘rtta bob, xulosa va foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxatidan iborat. Dissertatsiyaning hajmi 127 betni tashkil qilgan bo‘lib, 45 rasm, 24 jadvalni o‘z ichiga oladi.

DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

Kirish qismida dissertatsiya mavzusining dolzarbligi, zarurati asoslangan, tadqiqotning respublika fan va texnologiyalari rivojlanishining asosiy ustuvor yo‘nalishlari bilan bog‘liqligi, muammoning o‘rganilganlik darajasi, oliy ta’lim muassasasining ilmiy–tadqiqot ishlari rejalari bilan bog‘liqligi, tadqiqotning

maqsadi, vazifalari, usullari, tanlangan ob'ektlari, predmeti va ilmiy yangiligi ko'rsatilgan, tadqiqotning amaliy natijasi va natijalar ishonchliligining tasdiqlanganligi, ilmiy va amaliy ahamiyati, amaliyotga joriy qilinishi, respublika va xorijda tadqiqot ishining aprobatsiyasi, e'lon qilinganligi haqida ma'lumotlar hamda dissertatsiyaning tuzilishi va hajmi keltirilgan.

Dissertatsiyaning **“Molekulalararo ta'sirlashuv bilan bog'liq muammolar va ularni spektroskopik usullar bilan tadqiq qilishning bugungi holati”** nomli birinchi bobida suyuqliklarda yorug'likning kombinatsion sochilish (YKS) va infraqizil (IQ) yutilish spektrlarining namoyon bo'lish mexanizmlariga tegishli klassik hamda kvant nazariyalariga oid adabiyotlar sharhi keltirilgan. Ushbu sohada turli xil strukturaga ega bo'lgan kondensirlangan muhitlar tarkibidagi molekulalarning aylanma va tebranma harakati bilan bog'liq bo'lgan spektrlarning kuzatilishida H-bog'lanishi bilan bog'liq fizik qonuniyatlarni o'rganishga taalluqli ishlar, O'zbekiston Respublikasida, xalqaro hamda Mustaqil Davlatlar Hamdo'stligi mamlakatlarida olib borilayotgan ilmiy tadqiqotlar natijalari tahlil qilingan. Mavzuga tegishli adabiyotlar sharhidagi ma'lumotlarning tahlili asosida dissertatsiyaning maqsadi va vazifasi belgilandi.

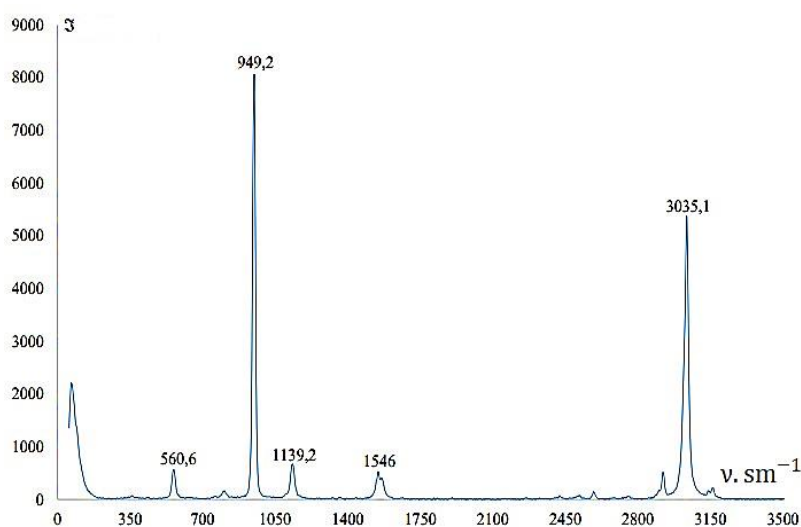
Dissertatsiyaning **“Ko'p atomli suyuq moddalardagi relaksatsion jarayonlar qonuniyatlarini tadqiq qilishning eksperimental metodlari”** nomli ikkinchi bobida moddalar tarkibidagi molekula va atomlarning aylanma va tebranma harakatlaridan hosil bo'ladigan YYS va IQ yutilish spektrlarini tajribada qayd qilishda tadqiqot ob'ektlarga alohida talab qo'yilishini e'tiborga olib, ularning kimyoviy struktura formulalari, tozalash usullari va fizik-kimyoviy parametrlari to'g'risida batafsil ma'lumotlar berilgan. Tadqiqot olib borilgan o'ta zamonaviy inViaRaman va Spectrum Two FT-IR spektrometrlarining ishlash prinsiplari hamda ularga tegishli bir qator parametrlari to'g'risida ma'lumotlar keltirilgan¹.

Dissertatsiyaning uchinchi bobi **“Strukturasi benzol halqasidan tashkil topgan aromatik uglevodorodlarda yorug'likning kombinatsion sochilish va infraqizil yutilish spektrlarini namoyon bo'lish mexanizmlari hamda ular asosida kvant-kimyoviy hisoblashlar”** ga bag'ishlangan bo'lib, qutblanuvchanlik tenzori bo'yicha simmetrik va asimmetrik bo'lgan molekulalarning tebranma harakat qonuniyatlarini YYS hamda IQ yutilish spektrlarida namoyon bo'lishi, kvant-kimyoviy hisoblashlar asosida atomlarning joylashish qonuniyatlarini modellashtirish, relaksatsion jarayonlarga tegishli asosiy fizik parametrlarini aniqlash usullari keltirilgan.

Strukturasi benzol halqasidan tashkil topgan dioksan ($C_4H_8O_2$), toluol ($C_6H_5-CH_3$), ortodixlorbenzol ($C_6H_4Cl_2$), siklogeksan (C_6H_{12}) kabi ba'zi suyuq aromatik uglevodorodlardagi molekulalararo o'zaro ta'sirlarni ularning YYS va IQ yutilish spektrlari yordamida tahlil qilingan. Bu molekulalarning barchasi benzol halqasidan iborat bo'lib, ularning ba'zi atomlari boshqa atomlar yoki atomlar guruhlar bilan almashtiriladi. Dioksanda benzol halqasining ikkita uglerod atomi kislorod atomlari bilan, toluolda bitta vodorod atom metil guruhi bilan, ortodixlorbenzolda ikkita vodorod atomi xlor bilan, siklogeksanda oltita vodorod atomi H_2 bilan almashtirilgan.

¹ O'zR FA U.A. Arifov nomidagi Ion-plazma va lazer texnologiyalari institutidagi ilmiy laboratoriyada olingan bo'lib, institut rahbariyatiga minnatdorlik bildiramiz.

Benzol molekulasining YKS spektri etalon sifatida olindi (1-rasm). Tadqiqot natijalariga asosan molekula tarkibidagi atomlar sonining oshib borishi bilan YKS spektrining soni va intensivliklari bir-biridan keskin farq qiluvchi spektrlar majmuasidan tashkil topishi aniqlandi. Masalan, o‘rganilgan chastotalar oralig‘ida etalon sifatida foydalanilgan benzol molekulasining tebranma harakatidan hosil bo‘ladigan spektrga nisbatan ortodixlorbenzol molekulasini uchun YKS spektrining soni oltitaga ko‘pligi qayd etildi. Benzol halqasiga metil va galoid guruhlarining birlashtirilishining har xil tabiati ularni qutbsiz uglevodorod o‘rnini bosuvchi suyuq fazadagi molekularning relaksatsiya jarayonlari tabiatiga ta‘sirini o‘rganish uchun amaliyotda qo‘llash imkoniyatini beruvchi ob‘ektlarga aylantiradi. Molekulalar tuzilishi ketma-ket murakkablashib boruvchi birikmalarni tizimli o‘rganish alohida ahamiyatga ega. Bu molekularning shakli va strukturasi molekulararo o‘zaro ta‘siridagi rolini tushunishga yordam beradi.



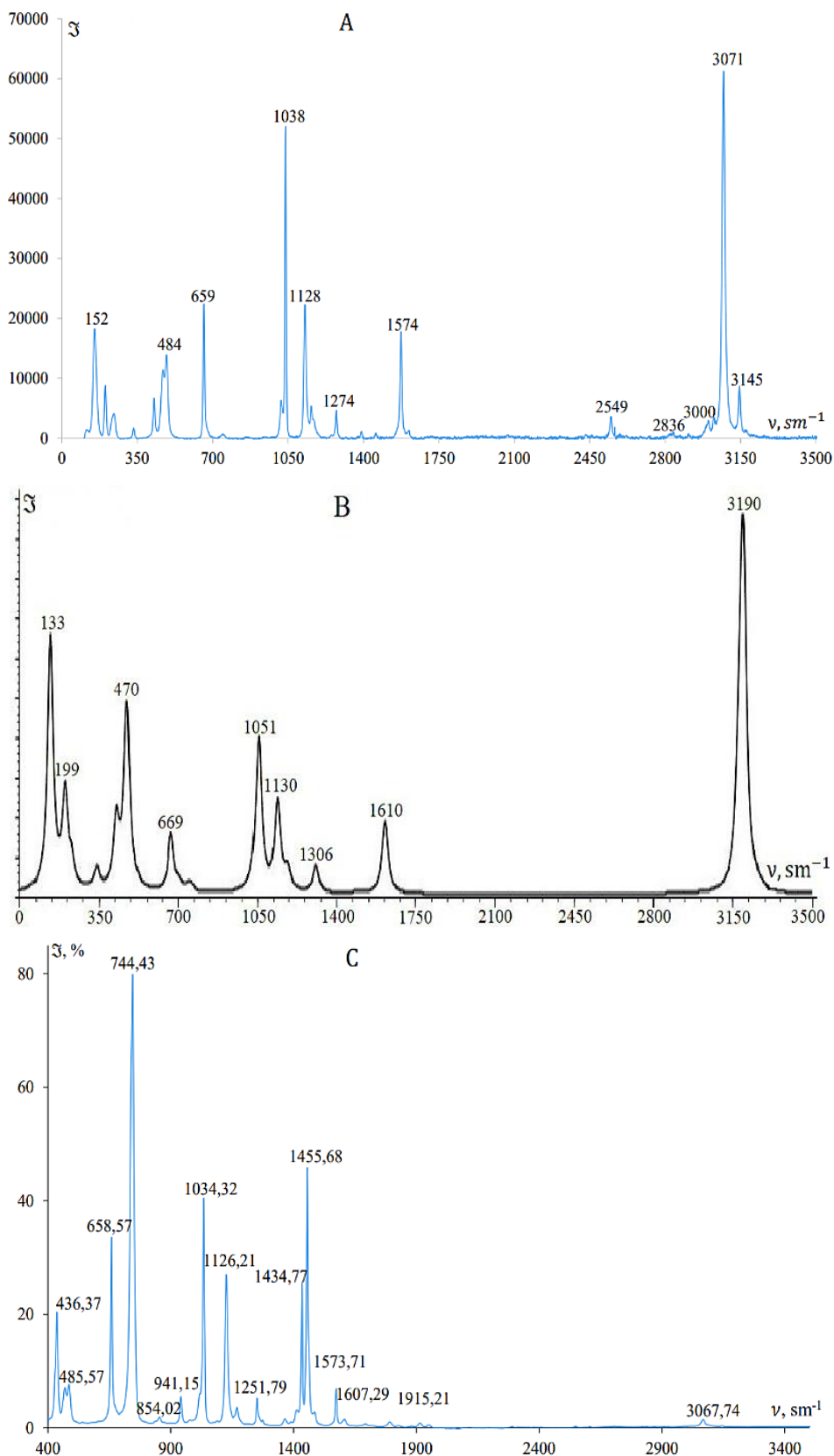
1-rasm. Benzol molekulasining YKS spektri

Masalan, aromatik uglevodorodlar tarkibiga kiruvchi benzol halqasidan tashkil topgan ortodixlorbenzol molekulasini uchun YKS va IQ yutilish spektrlarining chastota bo‘yicha taqsimoti 2-rasmda ifodalangan bo‘lib, dioksan, toluol, siklogeksan molekulari spektrlarining namoyon bo‘lish mexanizmlari to‘g‘risida ma‘lumotlar dissertatsiyada mukammal keltirilgan.

Tajribadan olingan YKS spektri soni va kvant-kimyoviy usul bilan hisoblangan YKS spektri soni tajriba xatoligi doirasida deyarli bir xil natijalar kuzatilgan. Bu YKS spektrining chastota bo‘yicha taqsimotini eksperimental tajriba o‘tkazishdan oldin aniqlash imkoniyatini beradi.

YKS va IQ spektroskopiya bir-birini to‘ldiradigan metod hisoblanadi. YKS va IQ spektrlarining chastota bo‘yicha taqsimot qonuniyatlarining tahlili shuni ko‘rsatadiki, YKS va IQ spektrlarining soni bir-biridan farq qiladi va ularning intensivliklarining absolyut qiymatlari ham turlicha. YKS spektri tebranma harakatning sodir bo‘lishi oqibatida molekulaning qutblanuvchanlik tensorini o‘zgarishi bilan, IQ yutilish spektri esa molekulaning tebranma harakati natijasida dipol momentini o‘zgarishi bilan bog‘liq bo‘ladi. Molekulaga qandaydir atomlarning kiritilishi yoki molekulaning geometrik tuzilishiga ta‘sir etadigan

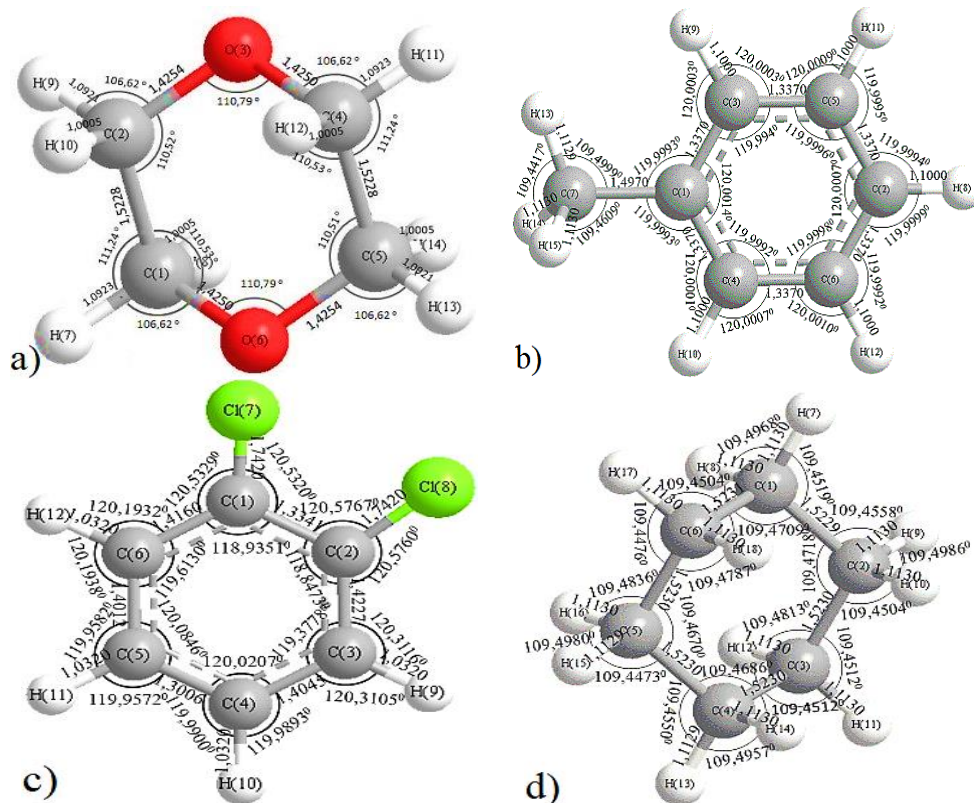
qandaydir o‘rin almashtirishlar maxsus chastotalar qiymatining o‘zgarishiga sababchi bo‘ladi.



2-rasm. Ortodixlorbenzol molekulasini uchun: A-eksperimentdan olingan YKS spektri, B- kvant-kimyoviy usul bilan hisoblangan YKS spektri, C – eksperimentdan olingan IQ spektri

Molekulaning tebranishi natijasida kimyoviy bog‘larning uzunligi o‘zgarib, bu bog‘lar orasidagi burchak kam o‘zgarsa, bunday tebranish turlariga valent tebranishlar deb aytiladi. Agar tebranish natijasida valent bog‘lar orasidagi burchak o‘zgarib, bu bog‘lar uzunligi o‘zgarmasa, bunday tebranish turlari deformatsion tebranish deyiladi. Masalan, ortodixlorbenzol molekulasidagi C-H bog‘lanishga tegishli deformatsion tebranishlarda YKS spektridagi chastotaning 1038 sm^{-1} qiymatga to‘g‘ri kelgan spektr IQ spektrda $1034,32\text{ sm}^{-1}$ ga teng bo‘lib, $3,68\text{ sm}^{-1}$ qiymatga siljigan. YKS va IQ spektrlardagi ushbu farq kichik bo‘lganligi sababli C-H tebranishlar bir jinsli hamda barqaror qonuniyatga ega degan xulosaga kelish mumkin. Spektrlarning intensivliklari esa bir-biridan keskin farq qilib, YKS spektr intensivligi IQ spektridan bir necha barobar katta qiymatni qabul qiladi. Demak, YKS spektr faol bo‘lib, molekulaning qutblanuvchanlik tenzorini o‘zgarishi bilan bog‘liq.

Tajribada olingan natijalarga asosan C-H va C-Cl bog‘lanishlarga ega bo‘lgan ortodixlorbenzol molekulasining tebranma harakatidan hosil bo‘lgan YKS spektrlarining chastota bo‘yicha taqsimoti murakkab qonuniyat bilan o‘zgarishi aniqlandi. YKS spektrlari tarkibidagi intensivliklarining qiymatlari nisbatan katta bo‘lgan $152, 659, 1038, 1128, 1574, 3071\text{ sm}^{-1}$ ga to‘g‘ri kelgan spektrlar bizning fikrimizcha, H-bog‘lanishlarga ega bo‘lgan C-H tebranishlar bilan bog‘liq deb xulosa qilishga to‘la asosimiz bor. Elektromagnit to‘lqin nurlanishi ta’sirida (bizning eksperimental tadqiqotimizda lazer nurlanishidan foydalanilgan) ortodixlorbenzol molekulasining tebranma-aylanma harakati atomlarning massasiga va ular orasidagi o‘zaro ta’sirlashuv kuchlariga bog‘liq bo‘ladi.



3-rasm. a) Dioksan b) Toluol c) Ortodixlorbenzol d) Siklogeksan molekulari uchun kvant-kimyoviy hisoblashlar natijasida olingan elektron strukturasi

Vodorod elementlarning davriy sistemasidagi (jadvalidagi) eng yengil element tarkibiga kiradi. Uning yadrosi bitta proton hamda elektron qobig'ida esa bitta elektronni tashkil qiladi. Bu xossalar YKS spektrini namoyon bo'lishida H-bog'lanishning o'rni alohida ekanligini ko'rsatadi. Jumladan, YKS spektrlari intensivliklarining qiymatlarini bir-biridan farq qilishi ortodixlorbenzol molekulasi tarkibidagi atomlarning bog'lanish uzunligi hamda ular orasidagi burchaklarga bog'liq bo'ladi. H-bog'lanishlar donor-akseptor $n - \sigma$ elektron bog'lanishlari bilan bog'liq bo'lgan molekulalararo ta'sirlashuvga ega bo'lib, hatto o'zaro ta'sirlashayotgan molekulalarning strukturasi o'zgarishiga ham sabab bo'lishi mumkin.

Tajriba natijalarini kvant – kimyoviy hisoblashlar bilan taqqoslash maqsadida ORCA dasturida zichlikning funksional nazariyasi (DFT) usuli va (B3LYP) HF/6-311G ** bazislar to'plami asosida kvant – kimyoviy hisoblashlar olib borildi. Kvant-kimyoviy hisoblashlar muhit molekulasi tarkibidagi atomlarning o'zaro bog'lanish energiyasini, bog'lanish uzunligini, atomlar orasidagi burchakni, molekulaning quyi energetik sathdan yuqori energetik sathga o'tish uchun zarur bo'ladigan molekulaning faollashuv energiyasini hamda boshqa bir qator relaksatsion jarayonlarni xarakterlovchi fizik kattaliklarni aniqlashda foydalanilib, bunday hisoblashlar natijasida olingan molekulalarning elektron strukturasi 3-rasmda ifodalangan.

Molekulalar tarkibidagi atomlarning bog'lanish (faollashuv) energiyasini aniqlash uchun kvant-kimyoviy hisoblashlar yordamida takomillashtirilgan yarim emperik usuldan (1-formula) foydalanildi.

$$U = 950,5 \exp(-1,98r) - 1995 \exp(-3,7r) \quad (1)$$

Boshqa atomlarning ta'sirini e'tiborga olmaganda ushbu ifoda tajriba natijalari bilan mos keladi va (1)-formuladagi r-vodorod atomlari orasidagi angstremlarda ifodalangan masofani xarakterlaydi. Vodorod bog'lanish energiyasini bilgan holda, vodorod bog'lanishning yashash vaqtini aniqlashda Y.I. Frenkel nazariyasidan foydalanib (2-formula) hisoblandi.

$$\tau = \tau_0 \exp(U/kT) \quad (2)$$

bu yerda: τ – vodorod bog'lanishning yashash vaqti, $\tau_0 = 1/2\pi\nu c$ – molekulaning tebranish chastotasini xarakterlovchi vaqt (tebranish davri desa ham bo'ladi), c – yorug'likning vakuumdagi tezligi, ν – molekulaning tebranish chastotasi (2A.-rasmdagi YKS spektriga tegishli intensivlikning maksimal qiymatiga to'g'ri kelgan chastota), U – vodorod bog'lanish energiyasi. Ushbu kattaliklarning qiymatlarini aniqlab, tajribadan topilgan ortodixlorbenzol molekulasining YKS spektrlari uchun (2)-formula yordamida vodorod bog'lanish bilan bog'liq bo'lgan bir qator asosiy fizik kattaliklarning qiymatlari aniqlandi (1-jadval) va dissertatsiyada qolgan molekulalar uchun bu qiymatlar hisoblangan. Jadvaldagi fizik kattaliklarning tahliliga asosan, tajribada kuzatilgan YKS spektri intensivligining maksimal qiymatlariga to'g'ri kelgan molekulaning tebranish chastotasining oshib borishi bilan ortodixlorbenzol molekulasining tajribadagi C-H vodorod bog'lanishining yashash vaqti kamayib borishi kuzatildi (τ ning qiymati $18,8 \cdot 10^{-13}$ s dan $0,031 \cdot$

10^{-13} s gacha kamaygan). Bu qonuniyat ortodixlorbenzol molekulasining quyi energetik sathdan yuqori enegetik sathga ko‘tarilishi uchun kerak bo‘lgan energiyaning kamayishi bilan bog‘liq deb qarash mumkin. Quyi chastotalarda ham bir qator YKS spektrlari kuzatilgan bo‘lib (152, 202, 273, 341, 387, 484 sm^{-1}), bu spektrlarning namoyon bo‘lishi molekulaning aylanma-chayqalma harakati bilan bog‘liq.

1-jadval.

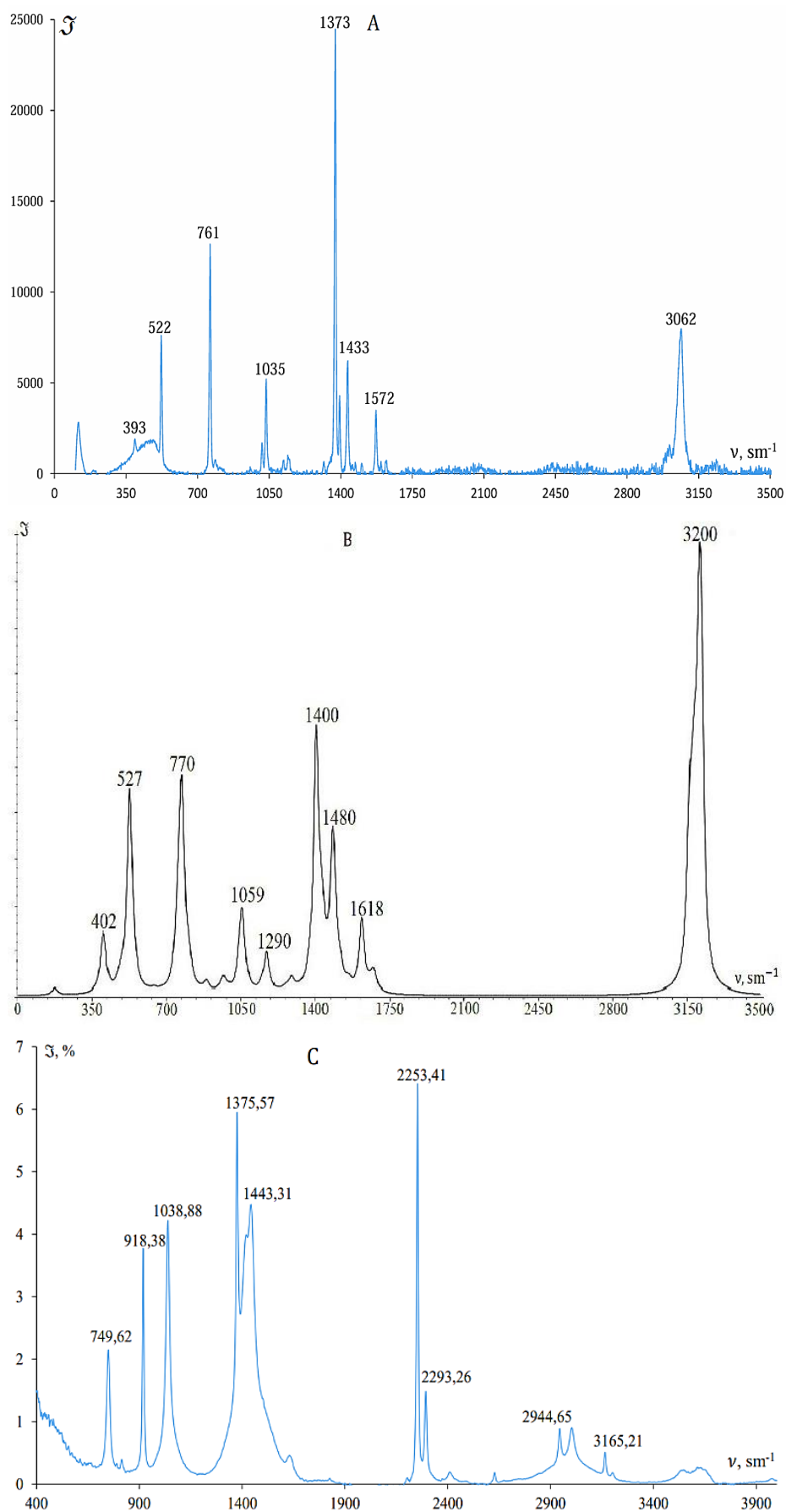
Ortodixlorbenzol molekulasida uchun nazariy hisoblashlarga asoslangan vodorod bog‘lanishlariga tegishli fizik kattaliklar

ν, sm^{-1}	$\tau_0, 10^{-14}\text{s}$	U, kJ/mol	$\tau, 10^{-13}\text{s}$
152	3,49	10,0	18,8
659	0,80	8,2	2,32
1038	0,51	5,0	0,408
1128	0,47	4,3	0,275
1574	0,33	3,0	0,113
3071	0,17	1,5	0,031
Statistik xatolik	$\pm 2\%$		$\pm 2\%$

Dissertatsiyaning to‘rtinchi bobi “**Murakkab strukturali organik birikmali uglevodorodlarda yorug‘likning kombinatsion sochilish va infraqizil yutilish spektrlarini namoyon bo‘lish mexanizmlari hamda ular asosida kvant-kimyoviy hisoblashlar**” deb nomlanib bunda, molekulalar tuzilishi ketma-ket murakkablashib boruvchi birikmalarni tizimli o‘rganishga alohida ahamiyat berilib, molekulalararo o‘zaro ta’sirlashuv qonuniyatlari YKS va IQ yutilish spektrlari yordamida tadqiq qilishga bag‘ishlangan hamda tajriba natijalari kvant-kimyoviy hisoblashlar yordamida takomillashtirilgan.

Molekulalarning kimyoviy-fazoviy tuzilishi ketma-ket murakkablashadigan asetonitril – $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}$, dimetilformamid (DMF) $((\text{CH}_3)_2\text{NCOH})$, xinolin ($\text{C}_9\text{H}_7\text{N}$) molekulalarni bunday tizimlashtirish YKS va IQ yutilish spektrlarining hosil bo‘lish qonuniyatlarini o‘rganishda alohida ahamiyatga ega bo‘lib, bu molekulalarning tuzilishi va tarkibini mukammal o‘rganish imkonini beradi. Ko‘p atomli molekulalardagi tebranma spektrlarning namoyon bo‘lish qonuniyatini tahlil qilish murakkab hisoblanadi. Chunki, atomlar bir vaqtning o‘zida bir nechta tebranishlarda ishtirok etadi. Molekulaning ichidagi atomlarning harakati murakkab jarayon hisoblanib, nohiziqli molekulalar N ta atomdan tashkil topgan bo‘lsa, tebranma erkinlik darajalari soni $3N-6$ ga teng bo‘ladi. Tebranma erkinlik darajalari miqdori molekulaning xususiy tebranishlar soniga teng bo‘ladi. Ushbu har bir xususiy tebranishlar o‘zining xususiy chastotasiga ega. Yutilish esa ma’lum bir chastotalar oralig‘ida sodir bo‘lib, IQ spektrlarni hosil qiladi.

4-rasmda asetonitril molekulasida uchun chastotaning $0-3500 \text{ sm}^{-1}$ diapozondagi YKS va $400-4000 \text{ sm}^{-1}$ diapozondagi IQ yutilish spektrlarining umumiy ko‘rinishi berilgan bo‘lib, dissertatsiyada DMF va xinolin molekulalari spektrlarining hosil bo‘lish qonuniyatlari haqida batafsil bayon qilingan.



4-rasm. Asetonitril molekulasi uchun: A-eksperimentdan olingan YKS spektri, B- kvant-kimyoviy usul bilan hisoblangan YKS spektri, C – eksperimentdan olingan IQ spektrining chastota bo‘yicha taqsimoti

YKS va IQ spektrlarining chastota bo'yicha taqsimot qonuniyatlarining tahlili shuni ko'rsatadiki, YKS va IQ spektrlarining soni bir-biridan farq qiladi va ularning intensivliklarining absolyut qiymatlari ham turlicha. Yuqorida qayd qilinganidek, YKS spektrlarining intensivligi molekulaning qutblanuvchanlik tenzorini o'zgarishi bilan bog'liq bo'lib, IQ spektrlarda esa molekulaning dipol momentini o'zgarishi bilan bog'liq bo'ladi. YKS spektrini C-H tebranishi bilan bog'liq bo'lgan spektral intervalni ko'rib chiqamiz. Bu tebranish molekulalararo H-bog'lanish tebranishlari bilan bog'liq bo'lishi mumkin. Asetonitril molekulasi uchun C-H tebranish bilan bog'liq bo'lgan 7 ta spektr kuzatilgan bo'lib, ularning chastotalari 378, 919, 1374, 2253, 2734, 2934, 2944, 3004 sm^{-1} qiymatlarga to'g'ri keladi. Quyi chastotalarga to'g'ri kelgan YKS spektrlari (378, 919 sm^{-1}) asetonitrilning aylanma-chayqalma harakati bilan bog'liq.

Asetonitril molekulasi uchun tajriba va kvant-kimyoviy hisoblashlardan olingan YKS spektrlarining chastotalari va intensivliklari qiymati 2-jadvalda keltirilgan. 2-jadvalga ko'ra tajriba va kvant-kimyoviy usulda hisoblangan asetonitrilning aylanma-tebranma harakatidan hosil bo'lgan YKS spektrining qiymatlari tajriba xatolik doirasida bir-biriga mos tushadi deyish mumkin.

2-jadval.

Asetonitril molekulasi uchun tajriba va kvant-kimyoviy hisoblashlardan olingan YKS spektrlarining chastotalari va intensivliklari qiymati

Tajriba		Kvant-kimyoviy hisoblash	
ν, sm^{-1}	$\tilde{\nu}$	ν, sm^{-1}	$\tilde{\nu}$
378	6223	381	1252
919	11172	928	365
1374	4750	1470	645
2253	54796	2365	1695
2292	4937	2365	1695
2944	113155	3040	3150
3004	7427	3110	1320

Molekulalarning tebranma harakati bilan bog'liq qonuniyatlarini hamda spektrlarining namoyon bo'lish mexanizmlari to'g'risida tegishli ma'lumotlar olishda molekulaning potensial chuqurlik balandligining (molekulaning faollashuv energiyasi) qiymatlarini bilish katta ahamiyatga ega. Bu energiya kattaligini aniqlashning bir nechta usuli mavjud bo'lib, yarim emperik usul bilan hisoblash mumkin (1-formula). Unga asosan potensial chuqurlik balandligini o'zaro tebranishda bo'lgan molekulalarning bir-biri bilan itarilish hisobiga hosil bo'lgan energiya farqiga teng deb qarash mumkin. Ushbu energiya H-bog'lanishning energiyasiga proporsional bo'lib, uning qiymati kvant-kimyoviy hisoblashlar yordamida aniqlash mumkin.

Kvant-kimyoviy hisoblashlar yordamida molekulalarning elektron strukturasi HF/6 – 311G** Hartri-Fok usuli yordamida kompyuterda modellashtirilib (5-rasm), atomlarning bog'lanish uzunliklari (angstromda, Å) va ular orasidagi fazoviy burchaklar aniqlandi.

IQ spektrlarining qonuniyatlariga qarab, valent tebranishda molekulaning tebranishlari atomlarining bog'lanish yo'nalishi bo'yicha atomlar orasidagi masofani o'zgarishiga olib keladi. Deformatsion tebranishda esa atomlar orasidagi masofa o'zgarishiga bo'lib, atomlar orasidagi burchaklarni o'zgarishiga sabab bo'ladi. Jumladan, asetonitril molekulasi YKS va IQ spektrlaridagi H-bog'lanishga tegishli valent tebranishlarning chastotalari bir-biridan farq qiladi. Masalan, YKS spektridagi chastotaning 1374 sm^{-1} qiymatga to'g'ri kelgan spektr IQ spektrda $1375,57 \text{ sm}^{-1}$ ga teng bo'lib, $1,57 \text{ sm}^{-1}$ qiymatga siljigan. YKS va IQ spektrlardagi ushbu farq kichik bo'lganligi sababli H-bog'lanishlar bir jinsli hamda barqaror qonuniyatga ega degan xulosaga kelish mumkin. Spektrlarining intensivliklari esa bir-biridan keskin farq qilib, IQ spektr intensivligi YKS spektridan bir necha barobar katta qiymatni qabul qiladi. Demak, IQ spektr faol bo'lib, molekulaning dipol momentini o'zgarishi bilan bog'liq.

Molekulalarda YKS spektrini namoyon bo'lishida H-bog'lanishlarning o'rni alohida ekanligi, tajriba asosida aniqlangan YKS spektri yordamida H-bog'lanishning yashash vaqti, energiyasi hamda molekulaning tebranish chastotasini xarakterlovchi vaqt aniqlandi va ularni nazariy yo'l bilan hisoblash metodikasi tavsiya qilindi. IQ spektrda esa H-bog'lanishdan tashqari valent hamda deformatsion tebranishlarning ta'siri ham alohida ekanligi qayd etildi.

XULOSALAR

Dissertatsiya ishidagi eksperimentdan olingan natijalar va nazariy hisoblashlar asosidagi ma'lumotlarni batafsil tahlili quyidagi xulosalarni chiqarish imkonini berdi:

1. Ilk bor lazer nurlanishining tadqiqot ob'ekti tarkibidagi atom va molekulalarning energetik sathlarida sodir bo'ladigan relaksatsion jarayonlarning qonuniyatlarini xarakterlovchi optik spektrlarining namoyon bo'lish mexanizmlari tahlil qilinib, YKS va IQ spektrlarining tabiati turlicha ekanligi aniqlandi. Jumladan, bu spektrlar intensivliklari bilan hamda ularning chastota bo'yicha taqsimotlarida ham farq bo'lishi kuzatildi. Bu esa YKS spektrining namoyon bo'lish qonuniyatlari molekulalarning qutblanuvchanlik tenzorini o'zgarishi bilan bog'liq bo'lsa, IQ spektrida molekulalarning dipol momentining o'zgarishi bilan bog'liq ekanligi aniqlandi.

2. Ilk bor qutblanuvchanlik tenzori bo'yicha simmetrik va asimmetrik bo'lgan tadqiqot ob'ektlarida YKS va IQ spektrlarining hosil bo'lish mexanizmlarini tahlili asosida ilmiy asoslangan tavsiyalar berildi. Jumladan, lazer nurlanishini molekulalarning o'zaro ta'sirlashuvi bilan bog'liq bo'lgan H-bog'lanishlari kuzatiladigan molekulalar uchun vodorod bog'lanishining yashash vaqti τ ($\sim 10^{-13}$ s) nazariy hisoblanib, molekulalarning tebranish chastotasi oshib borishi bilan H-bog'lanishning yashash vaqti kamayishi kuzatildi. Bu qonuniyat molekulalarning quyi energetik sathdan yuqori energetik sathga ko'tarilishi uchun kerak bo'lgan faollashuv energiyasining kamayishi bilan bog'liq bo'lib, tadqiqot natijalarining tahlili asosida ilmiy xulosalar chiqarish imkonini berdi. Molekulalarning tebranish qonuniyatlariga tegishli bir qator molekulyar parametrlarni (τ, τ_0, U va hokazo) aniqlash metodikasi tavsiya qilindi.

3. Tadqiqot ob'ektlariga tegishli molekular tarkibidagi atomlarning joylashish tartibini qo'llagan holda Xartri-Fok usuli yordamida kompyuterda modellashtirilib, kvant-kimyoviy hisoblashlar olib borildi va molekularning strukturaviy modeli yaratildi. Molekula tarkibidagi atomlararo bog'lanish uzunliklari, ular orasidagi burchaklarni aniqlash bo'yicha tavsiyalar berilib, YKS spektrining chastota bo'yicha taqsimotining nazariy hisoblash metodikasi ishlab chiqildi. Ushbu metodika yordamida olingan nazariy hisoblashlarga asoslangan YKS spektrlari soni tajribadan olingan YKS spektrlarining chastota bo'yicha taqsimotidagi spektrlar soniga tajriba xatoligi doirasida deyarli ustma-ust tushganligi aniqlandi.

4. Ilk bor tajribada olingan natijalarga asosan C-H va C-Cl bog'lanishlariga ega bo'lgan molekularlarda jumladan, ortodixlorbenzol molekulasining tebranma harakatidan hosil bo'lgan YKS spektrlarining chastota bo'yicha taqsimoti murakkab qonuniyat bilan o'zgarishi qayd etildi. YKS spektrlarining tarkibidagi intensivliklarning qiymatlari nisbatan katta bo'lgan 152, 659, 1038, 1128, 1574, 3071 sm^{-1} ga to'g'ri kelgan spektrlar H-bog'lanishga ega bo'lgan C-H tebranishlar bilan bog'liq ekanligiga asos bo'lishi mumkin. H-bog'lanishlar donor-akseptor $n - \sigma$ elektron bog'lanishi bilan bog'liq bo'lgan molekulararo ta'sirlashuvga ega bo'lib, hatto o'zaro ta'sirlashayotgan molekularning strukturasi o'zgarishiga ham sabab bo'lishi mumkin.

5. Tadqiqot ob'ektlarida olib borilgan kvant-kimyoviy hisoblashlarning natijalari aniq maqsadga yo'naltirilgan kimyoviy moddalarni sintez qilishda, molekularning erkinlik darajalari bo'yicha qutblanuvchanlik tenzorining qiymatlarini nazariy hisoblashda foydalanish mumkin ekanligi bo'yicha tavsiyalar berildi.

6. Tadqiqot natijalari ko'p atomli uglevodorodlarning strukturasi yengil va og'ir atomlar (O, H, Cl, N va boshqalar) biriktirilganda molekularidagi strukturaviy o'zgarishlarni YKS va IQ spektrlariga ta'sirini aniqlash, energetik sathlardagi relaksatsion jarayonlarning qonuniyatlarini ifodalovchi molekulyar nazariyalar ishlab chiqishga xizmat qiladi.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ САМАРКАНДСКОМ
ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ ИМЕНИ
ШАРОФА РАШИДОВА**

НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ УЗБЕКИСТАНА

АЛЛАКУЛИЕВА ШАХЛОХОН ХАКИМБОЙ КИЗИ

**РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ
СРЕДАХ И ИХ ПРОЯВЛЕНИЕ В СПЕКТРЕ КОМБИНАЦИОННОГО
РАССЕЯНИЯ СВЕТА**

01.04.05 – Оптика

**АВТОРЕФЕРАТ
диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам**

Самарканд – 2024

Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Министерстве высшего образования, науки и инноваций Республики Узбекистан за № B2022.2.PhD/FM722.

Диссертация выполнена в Национальном университете Узбекистана имени Мирзо Улугбека. Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета (www.samdu.uz) и на информационно-образовательном портале «Ziynet» (www.ziynet.uz).

Научный руководитель: **Отажонов Шавкат**
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Хушвактов Хаким Абдулхакович**
доктор физико-математических наук, профессор
Рахматуллаев Илёс Арзимуродович
доктор физико-математических наук, доцент

Ведущая организация: **Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А.Арифова**

Защита диссертации состоится «___» _____ 2024 года в ___ часов на заседании Научном совете PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 при Самаркандском государственном университете имени Шарофа Рашидова. (Адрес: 140104, г. Самарканд, Университетский бульвар, 15. Тел.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; факс: (99866) 239-11-40; e-mail: rektor@samdu.uz Самаркандский государственный университет имени Шарофа Рашидова, Институт инженерной физики, 1 этаж, 114 аудитория).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Самаркандского государственного университета имени Шарофа Рашидова (зарегистрирована под №___). Адрес: 140104, г. Самарканд, Университетский бульвар, 15.Тел.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; факс: (99866) 239-11-40.

Автореферат диссертации разослан «___» _____ 2024 г.
(Реестр протокола рассылки №___ от «___» _____ 2024 г.)

М.Х.Ашуров
Председатель научного совета
по присуждению ученых степеней,
д.ф.-м.н., академик

Р.М.Ражабов
Ученый секретарь научного совета
по присуждению ученых степеней,
к.ф.-м.н., доцент

Д.И.Семенов
Председатель научного семинара при научном
совете по присуждению ученых степеней,
д.ф.-м.н., доцент

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации. Сегодня масштабные теоретические и научно-практические исследования, проводимые по всему миру, показывают, что изучение сильных межмолекулярных взаимодействий в трёх агрегатных состояниях вещества (за исключением газов) и закономерностей проявления физических процессов в этих состояниях является одной из актуальных задач. Особенно важно исследование природы межмолекулярных взаимодействий в конденсированных средах и определение их влияния на оптические спектры. Это имеет как фундаментальное, так и прикладное значение и является одним из основных направлений современной спектроскопии.

Несмотря на наличие ряда экспериментальных исследований и ограниченных теорий в существующей литературе, многие проблемы в области молекулярной оптики остаются нерешёнными. Поэтому в последние годы наблюдается рост числа научных исследований, посвящённых изучению закономерностей межмолекулярных взаимодействий и их влияния на оптические спектры.

Исследовательские работы в существующей научной литературе по данной области в большинстве случаев посвящены жидкостям с простой структурой, тогда как исследования веществ с многоатомной сложной структурой и возможности применения разрабатываемых теорий ограничены. Также существуют расхождения в экспериментальных результатах, что требует глубокого анализа. Необходимо проводить целенаправленные экспериментальные исследования и создавать более совершенные молекулярные теории.

Следует особо отметить, что в годы независимости, особенно за последние семь лет, усилилось внимание к всесторонней поддержке актуальных научных направлений, имеющих фундаментальное и прикладное значение. Изучение структуры конденсированных сред, молекулярного строения и закономерностей колебаний атомов в молекулах под воздействием электромагнитного излучения с помощью оптических спектров имеет важное значение для предоставления научно обоснованных рекомендаций по синтезу новых веществ, необходимых для промышленности.

Данное диссертационное исследование в определенной степени служит реализации задач, в Постановлениях Президента Республики Узбекистан № ПП-4358 «О мерах по коренному совершенствованию системы подготовки востребованных квалифицированных кадров и развитию научного потенциала в Национальном университете Узбекистана имени Мирзо Улугбека в 2019-2023 годах» от 17 июня 2019 года, № ПП-5032 «О мерах по повышению качества образования и совершенствованию научных исследований в области физики» от 19 марта 2021 года, № ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года, № УП-158 «О Стратегии Узбекистан – 2030» от 11 сентября 2023 года, а

также в других нормативно-правовых документах, относящихся к данной области исследования.

Соответствие исследования с приоритетными направлениями развития науки и технологий республики. Данная исследовательская работа выполнена в рамках приоритетного направления II: «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение» развития науки и технологии Республики.

Степень изученности проблемы. Изучение свойств жидких веществ с помощью спектроскопических методов проводилось учеными из различных стран, таких как Katarzyna Z. Gaca-Zajac, Benjamin R. Smith, Alison Nordon, Ashleigh J. Fletcher, Karen Johnston, Jan Sefcik (Англия) исследовали закономерности образования гидратированных связей в системах формальдегид-вода-метанол с помощью ИК и рамановской спектроскопий. В исследованиях Zhang Li-Qun, Li Hao-Ran (Китай) изучались структурные свойства ионных жидкостей и ионных смесей с помощью ИК и рамановской спектроскопий, а также проводился анализ на основе теоретических расчетов и компьютерного моделирования. P. Lalanne, T. Tassaing, Y. Danten, M. Besnard (Франция) исследовали водородные связи в молекуле этанола с помощью рамановской и инфракрасной спектроскопии в диапазоне частот 3500-3700 см⁻¹. Yuichi Takasu, Satoru Matsumoto, Yasuhiro Fujii, Izumi Nishio (Япония) анализировали динамику молекулы тетрагидрофурана с помощью рамановской спектроскопии. В исследованиях Dake Wang, Kathryn Mittauer, Nicholas Reynolds (США) изучались спектры рассеяния Рамана в углеродном дисульфиде, включая соотношение интенсивностей стоксовых и антистоксовых компонентов в зависимости от уровней колебательной энергии молекул.

Ученые из стран СНГ также проводили научные исследования в этой области: В.С. Горелик (Россия), В.Е. Погорелов, И.Ю. Дорошенко, Л.А. Булавин (Украина), В.М. Коровина (Таджикистан), Л.М. Сабиров, У.Н. Ташкенбаев, А. Жумабаев, Х. Хушвактов, А. Абсанов, Б. Куйлиев, Ш. Отажонов, Б. Эшчанов, М. Алижонов (Узбекистан) и другие.

В результате научных исследований с помощью спектроскопических методов были изучены закономерности взаимодействия молекул в различных конденсированных средах, определены некоторые физические параметры, связанные с релаксационными процессами, такие как некоторые закономерности Н-связей и кластеризации молекул. Полученные результаты были сопоставлены с существующими теориями и сделаны соответствующие выводы. В настоящее время продолжаются исследования, направленные на изучение механизмов проявления закономерностей релаксационных процессов с помощью оптических спектров.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ высшего учебного заведения, где выполнена диссертационная работа. Диссертационное исследование выполнено в рамках фундаментального проекта FZ-20200929385 «Разработка спектроскопических и неэмпирических методов анализа и применения

наноразмерных молекулярных кластеров биологических объектов» (2022-2027 гг.), проводимого в сотрудничестве с Национальным университетом Узбекистана имени Мирзо Улугбека, Самаркандским государственным университетом и Киевским национальным университетом в рамках государственных научно-технических программ. Работа также выполнена в рамках открытых планов научно-исследовательских работ Национального университета Узбекистана имени Мирзо Улугбека по исследованию релаксационных процессов в конденсированных средах с использованием спектроскопических методов.

Цель исследования. Целью исследования является изучение закономерностей релаксационных процессов, связанных с колебательным и вращательным движением многоатомных углеводородных молекул, симметричных и асимметричных по тензору поляризуемости, под воздействием лазерного излучения с использованием оптических спектров.

Задачи исследования:

уделять особое внимание положению атомов в структуре молекул. В частности, проводить исследование в логической последовательности начиная с молекул с малым числом атомов и переходя к многоатомным углеводородам со сложной структурой;

исследовать процессы, связанные с движением различных атомов, введённых в структуру бензольного кольца, на основе закономерностей проявления оптических спектров, определённых спектроскопическим методом в диапазоне частот $0-3500\text{ см}^{-1}$;

определить механизмы проявления оптических спектров и их доли, соответствующие определённым частотным диапазонам;

создать структурную модель молекул на основе квантово-химических расчётов;

исследовать закономерности водородных связей в молекулах, имеющих Н-связи;

определить молекулярные параметры на основе анализа закономерностей релаксационных процессов на энергетических уровнях молекул.

Объектом исследования в качестве объекта исследования были выбраны молекулы, состоящие из 7 углеводородов, структура которых варьируется от простой к сложной.

Предметом исследования являются свойства молекул, симметричных и асимметричных по тензору поляризуемости, природа процессов поглощения и излучения на энергетических уровнях, а также изучение влияния закономерностей межмолекулярного взаимодействия на оптические спектры.

Методы исследования. В диссертации использованы методы спектроскопии комбинационного рассеяния света, инфракрасной спектроскопии и методы квантово-химического моделирования.

Научная новизна исследования заключается в следующих:

разработана методика определения времени жизни Н-связей, обусловленной межмолекулярным взаимодействием под воздействием электромагнитного излучения;

впервые рассчитано время жизни Н-связей на основе спектров комбинационного рассеяния и установлено уменьшение времени жизни с увеличением частоты колебаний молекул;

проведены квантово-химические расчёты, создана структурная модель молекул, даны практические рекомендации по определению длин связей атомов и углов между связями;

впервые на основе сравнения спектров комбинационного рассеяния света, полученных из эксперимента, с инфракрасными спектрами был определён вклад в спектр, обусловленный изменением тензора поляризуемости или дипольного момента молекул;

изучено влияние закономерностей колебаний различных атомов, введённых в структуру бензола, на проявление спектров комбинационного рассеяния света и инфракрасных поглощения спектров. Установлено, что проявление спектров, связанных с движением молекул, состоящих из близко расположенных атомов, связано с деформационными колебаниями;

разработаны закономерности, связывающие тип колебаний с проявлением спектров комбинационного рассеяния света и инфракрасных поглощения спектров.

Практические результаты исследования заключается в следующем:

разработан метод расчёта времени жизни Н-связей с помощью спектров комбинационного рассеяния света, который может быть применён для анализа закономерностей взаимосвязей всех С=О, О-Н и других атомов;

на основе анализа спектров комбинационного рассеяния света, полученных в экспериментах, можно использовать результаты для определения состава и количества элементов в образцах в геологии, состава лекарств в фармакологии, а также для идентификации преступников в криминалистике (анализ спектра крови);

даны рекомендации по синтезу новых химических веществ, необходимых для практики, на основе анализа спектров комбинационного рассеяния света.

Достоверность результатов исследования объясняется использованием современных экспериментальных приборов, таких как спектрометры InViaRaman и Spectrum Two FT-IR, а также подтверждена публикацией статей в материалах республиканских и международных научно-практических конференций, в журналах, включённых в список ВАК и другие международные научные журналы (Scopus и Web of Science), а также утверждением выводов и рекомендаций компетентными организациями.

Научная и практическая значимость результатов исследования. Научное значение результатов исследования заключается в возможности теоретического и экспериментального изучения закономерностей релаксационных процессов, связанных с самопроизвольным и вынужденным излучением молекул при переходе с низких энергетических уровней на высокие под воздействием электромагнитного излучения и возвращении на низкие энергетические уровни. Также значение заключается в определении ряда физических параметров, связанных с межмолекулярными взаимодействиями.

Практическое значение результатов исследования заключается в определении влияния введения лёгких и тяжёлых атомов (O, H, Cl, N) в структуру многоатомных углеводов на спектры комбинационного рассеяния света и инфракрасные спектры, что служит для разработки молекулярных теорий, описывающих закономерностей релаксационных процессов.

Объекты исследования позволяют создать новые химические вещества с целевыми параметрами на основе анализа длин связей и углов между атомами в молекулах, полученных с использованием квантово-химических расчётов.

Внедрение результатов исследования. На основе научных результатов, полученных при исследовании закономерностей релаксационных процессов, связанных с колебательным движением молекул углеводов, выбранных в качестве объектов исследования:

научные результаты, касающиеся изменений тензора поляризуемости и дипольного момента молекул на основе сравнения спектров комбинационного рассеяния света и инфракрасных спектров, были использованы в международном научном проекте под номером REP-04032022-206 «Управление процессами появления оптических гармоник и распространения солитонов в оптоэлектронных сетях» (2022-2024 гг.). Эти результаты применялись для разработки моделей распространения оптических солитонов в низкоразмерных оптических материалах и экспериментальных методов преобразования частоты среднего инфракрасного лазерного излучения в оптические гармоники на металлических наноструктурированных пленках (Справка №01/261 Чирчикского государственного педагогического университета от 5 февраля 2024 года);

результаты, касающиеся закономерностей H-связей между атомами, а также определения времени их существования на основе экспериментальных и теоретических расчётов, позволили определить механизмы процессов молекулярного кластерообразования в рамках фундаментального проекта государственной научно-технической программы под номером FZ-20200929385 «Разработка спектроскопических и неэмпирических методов анализа и применения наноразмерных молекулярных кластеров биологических объектов» (2022-2027 гг.) (Справка №10-2254 Самаркандского государственного университета имени Ш.Рашидова от 15 мая 2024 года);

результаты исследования нашли отражение в рабочей учебной программе и календарном плане специального курса «Классические и современные основы молекулярной оптики» для магистрантов по специальности 70530901 – Физика (по направлениям) кафедры фотоники физического факультета Национального университета Узбекистана имени Мирзо Улугбека. Эти результаты включают в себя методику определения основных молекулярных параметров релаксационных процессов на энергетических уровнях, связанных с изменением тензора поляризуемости и дипольного момента молекул в спектрах комбинационного рассеяния света и инфракрасных спектрах (Справка № 04/11-4483 Национального университета Узбекистана имени Мирзо Улугбека от 23 мая 2024 года).

Апробация результатов исследования. Результаты исследования были обсуждены на 5 международных и 5 республиканских научно-практических конференциях.

Публикации результатов исследования. По теме исследования опубликовано 15 научных работ, включая 5 статей в научных изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов диссертаций на соискание учёной степени PhD (2 статьи республиканского уровня, 2 статьи в базе данных Scopus и 1 статья в международной базе журналов Web of Science).

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка использованной литературы. Объём диссертации составляет 127 страниц, включая 45 рисунков и 24 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, её необходимость, связь исследования с основными приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики, степень изученности проблемы, связь с научно-исследовательскими планами высшего учебного заведения, цель и задачи исследования, методы, выбранные объекты и предмет исследования, научная новизна, практическая значимость результатов, их надёжность и внедрение на практике, апробация работы в республике и за рубежом, публикации по теме исследования, а также структура и объём диссертации.

Первая глава диссертации под названием «**Проблемы межмолекулярного взаимодействия и современное состояние их исследования спектроскопическими методами**» содержит обзор литературы, посвящённой классическим и квантовым теориям механизмов проявления спектров комбинационного рассеяния света (КРС) и инфракрасного (ИК) поглощения в жидкостях. Анализируются результаты научных исследований, проводимых в Республике Узбекистан, на международном уровне и в странах СНГ, касающиеся физических закономерностей Н-связей, проявляющихся в спектрах колебательного и вращательного движения молекул различных структур в конденсированных средах. На основе анализа данных из обзора литературы определены цель и задачи диссертации.

Во второй главе диссертации под названием «**Экспериментальные методы исследования закономерностей релаксационных процессов в многоатомных жидких веществах**» приводится информация о химических структурах, методах очистки и физико-химических параметрах исследуемых объектов, учитывая их требования при записи спектров КРС и ИК поглощения, образующихся от колебательного и вращательного движения молекул и атомов веществ. Приводятся данные о принципах работы и

параметрах современных спектрометров InViaRaman и Spectrum Two FT-IR, использованных в исследовании².

В третьей главе диссертации под названием «Механизмы проявления спектров комбинационного рассеяния света и инфракрасного поглощения в ароматических углеводородах, структура которых состоит из бензольного кольца, а также квантово-химические расчеты на их основе» посвящена изучению закономерностей колебательного движения молекул, симметричных и асимметричных по тензору поляризуемости, в спектрах КРС и ИК поглощения, моделированию расположения атомов на основе квантово-химических расчётов и методам определения основных физических параметров релаксационных процессов. Межмолекулярные взаимодействия в некоторых жидких ароматических углеводородах, таких как диоксана ($C_4H_8O_2$), толуола ($C_6H_5-CH_3$), ортодихлорбензола ($C_6H_4Cl_2$), циклогексана (C_6H_{12}) структура которых состоит из бензольного кольца, были проанализированы с помощью спектров КРС и ИК поглощения. Все эти молекулы содержат бензольное кольцо, в котором некоторые атомы заменены другими атомами или группами атомов. Например, в диоксане два углеродных атома бензольного кольца заменены кислородом, в толуоле один атом водорода заменен метиловой группой, в ортодихлорбензоле два атома водорода заменены хлором, а в циклогексане шесть атомов водорода заменены H_2 .

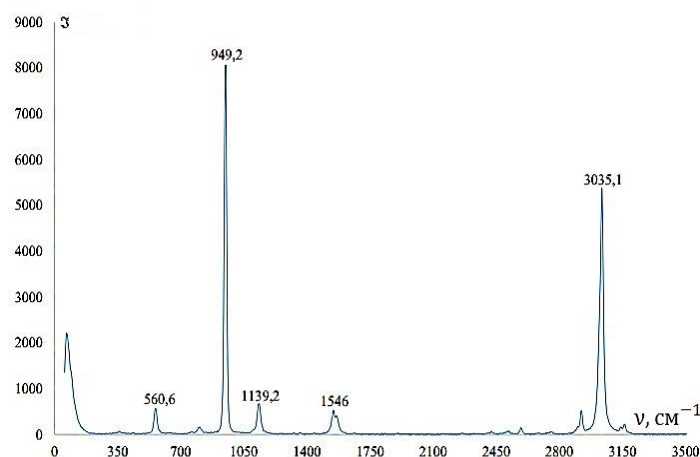


Рис.1. Спектр КРС бензола

За эталон был взят спектр КРС молекулы бензола (рис. 1). На основе результатов исследования установлено, что с увеличением числа атомов в молекуле количество и интенсивность спектров КРС существенно отличаются друг от друга. Например, в изученном диапазоне частот было зафиксировано, что количество спектров КРС для молекулы ортодихлорбензола больше на шесть по сравнению со спектром, образующимся при колебательном движении эталонной бензольной молекулы. Различная природа присоединения метильных и галогенных групп к бензольному кольцу превращает их в объекты, которые могут быть использованы на практике для изучения природы процессов релаксации молекул в жидкой фазе, заменяющих

² Научные результаты были получены в научной лаборатории института ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А. Арифова АН РУз, за что выражаем благодарность руководству института.

неполярные углеводороды. Систематическое изучение соединений, структура которых постепенно усложняется, имеет особое значение. Это помогает понять роль формы и структуры молекул в межмолекулярных взаимодействиях.

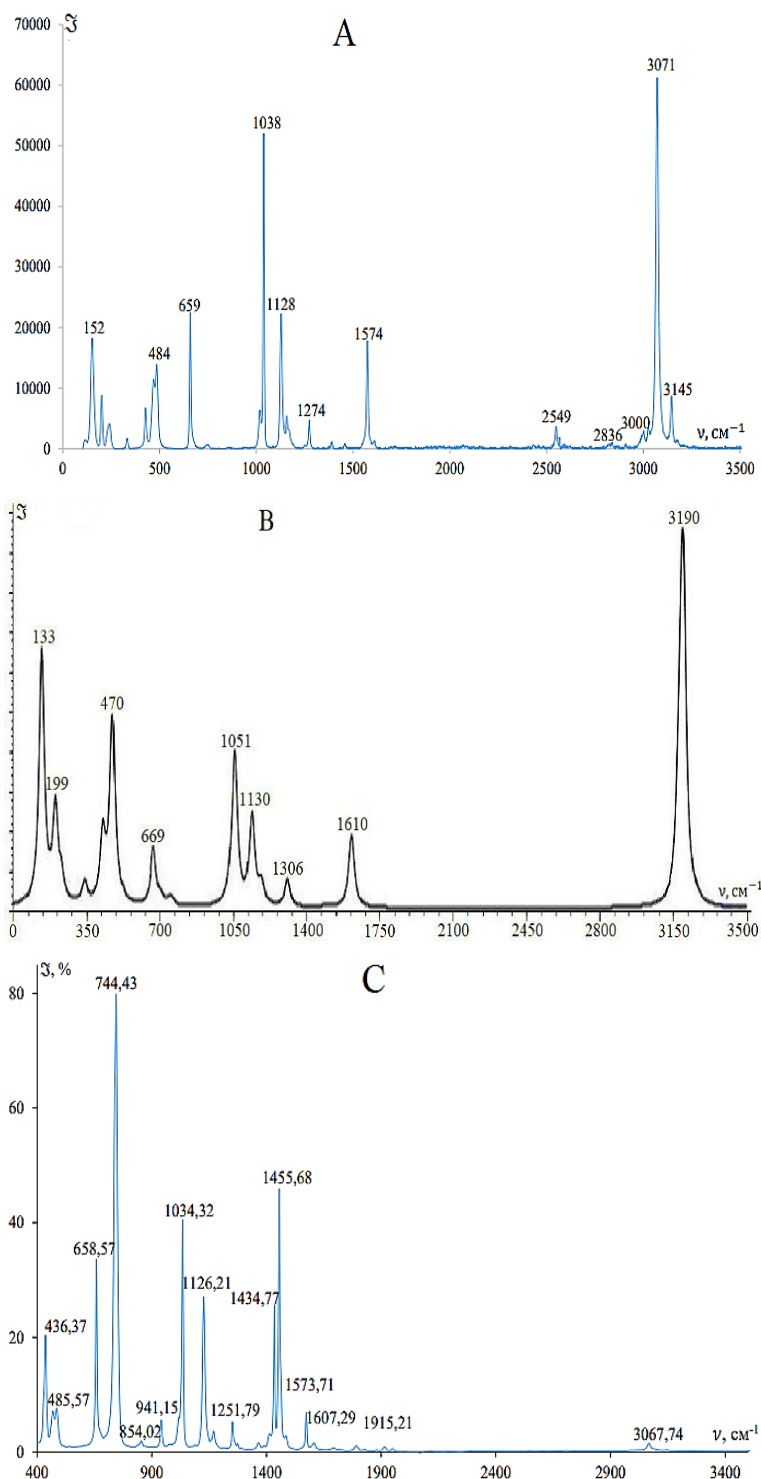


Рис.2. Для молекулы ортодихлорбензола: А - спектр КРС полученный из эксперимента, Б - спектр КРС рассчитанный квантово-химическим методом, С - ИК-спектр полученный из эксперимента

Например, распределение частот спектров КРС и ИК поглощения для молекулы ортодихлорбензола, состоящей из бензольного кольца, входящего в состав ароматических углеводородов, представлено на рис. 2, а механизмы

проявления спектров молекул диоксана, толуола и циклогексана подробно описаны в диссертации.

Экспериментальные число спектры КРС и теоретически рассчитанные число спектры КРС, полученные квантово-химическим методом, показали практически одинаковые результаты в рамках погрешности эксперимента. Это позволяет определить спектр КРС до проведения эксперимента.

Спектроскопии КРС и ИК являются взаимодополняющими методами. Анализ закономерностей распределения по частоте спектров КРС и ИК показывает, что спектры КРС и ИК различаются как по количеству, так и по абсолютным значениям их интенсивностей. Спектр КРС характеризуется изменением тензора поляризуемости молекулы в результате колебательного движения, в то время как спектр ИК определяется изменением дипольного момента молекулы в результате колебательного движения. Введение в молекулу некоторых атомов или некоторые замены, влияющие на геометрическое строение молекулы, вызывают изменение значения специальных частот. Если в результате колебания молекулы изменяется длина химических связей, причем угол между этими связями меняется мало, то такие виды колебаний называются валентными колебаниями. А если в результате колебания изменяется угол между валентными связями, а длина этих связей не изменяется, то такие виды колебаний называются деформационными. Например, в деформационных колебаниях, связанных со связью С-Н в молекуле ортодихлорбензола, спектр соответствующий значению частоты 1038 см^{-1} в спектре КРС равен $1034,32 \text{ см}^{-1}$ в спектре ИК и он смещён на $3,68 \text{ см}^{-1}$. Ввиду того, что эта разница в КРС и ИК-спектрах невелика, можно сделать вывод, что колебания С-Н имеют однородную и стабильную структуру. Интенсивности спектров резко отличаются друг от друга, причем интенсивность спектра КРС в несколько раз превышает интенсивность спектра ИК. Итак, спектр КРС активен и связан с изменением тензора поляризуемости молекулы.

На основании результатов, полученных в эксперименте было установлено, что частотное распределение спектров КРС, возникающее при колебательном движении молекулы ортодихлорбензола со связями С-Н и С-Сl будет меняться со сложной закономерностью. У нас есть все основания сделать вывод, что значения относительно больших интенсивностей в составе спектров КРС соответствующие спектрам $152, 659, 1038, 1128, 1574, 3071 \text{ см}^{-1}$, по нашему мнению, связано с колебаниями С-Н имеющими Н-связи. Колебательно-вращательное движение молекулы ортодихлорбензола под действием излучения электромагнитных волн (в нашем экспериментальном исследовании было использовано лазерное излучение) зависит от массы атомов и сил взаимодействия между ними. Водород – самый легкий элемент в периодической таблице элементов. Его ядро состоит из одного протона, а также одного электрона в электронной оболочке. Эти свойства указывают на особую роль Н-связи в проявлении спектра КРС. В частности, различие значений интенсивности спектров КРС зависит от длины связи атомов в молекуле ортодихлорбензола и углов между ними. Н-связи имеют межмолекулярные взаимодействия, связанные с донорно-акцепторными $n - \sigma$

электронными связями, и могут даже вызывать изменения в структуре взаимодействующих молекул.

Для сравнения экспериментальных результатов с квантово-химическими расчетами были проведены квантово-химические расчеты на основе метода теории функционала плотности (DFT) и базиса (B3LYP) HF/6-311G** в программе ORCA. Квантово-химические расчеты используются для определения энергии взаимодействия атомов в молекуле среды, длины связи, угла между атомами, энергии активации молекулы, необходимой для перехода с нижнего энергетического уровня на более высокий энергетический уровень, а также физических величин, характеризующих ряд других релаксационных процессов. Электронная структура молекул, полученная в результате таких расчетов, представлена на рис. 3.

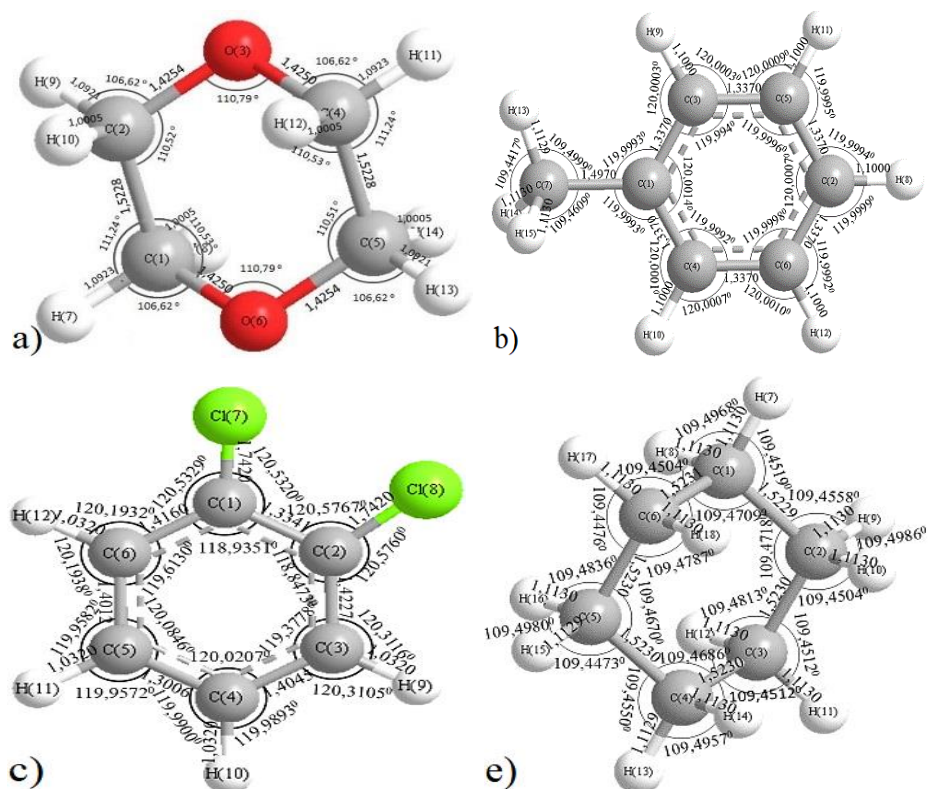


Рис. 3. Электронная структура, полученная на основе квантово-химических расчетов для молекул а) Диоксана б) Толуола в) Ортодихлорбензола г) Циклогексана

Для определения энергии связи (активации) атомов в молекулах использовался усовершенствованный полуэмпирический метод (формула 1) с использованием квантово-химических расчетов.

$$U = 950,5 \exp(-1,98r) - 1995 \exp(-3,7r) \quad (1)$$

Если пренебречь влиянием других атомов, то это выражение согласуется с экспериментальными результатами и r в формуле (1) характеризует выраженное в ангстремах расстояние между атомами водорода.

Зная энергию водородной связи, рассчитывается время жизни водородной связи по теории Я.И. Френкеля (формула 2).

$$\tau = \tau_0 \exp(U/kT) \quad (2)$$

где: τ – время жизни водородной связи, $\tau_0 = 1/2\pi\nu c$ время, характеризующее частоту колебаний молекулы (его также можно назвать периодом колебаний), c – скорость света в вакууме, ν – частота колебаний молекулы (Частота, соответствующая максимальному значению интенсивности, соответствующей спектру КРС на рис. 2А), U – энергия водородной связи. Определив значения этих величин, по формуле (2) для спектров КРС молекулы ортодихлорбензола, найденных экспериментально, были определены значения ряда основных физических величин, связанных с водородной связью (табл. 1), и в диссертации эти значения рассчитаны для остальных молекул. На основе анализа физических величин, приведенных в таблице, замечено, что время пребывания водородной связи С-Н молекулы ортодихлорбензола в эксперименте уменьшается с увеличением частоты колебаний молекулы, что соответствует максимальным значениям интенсивности спектра КРС, наблюдаемого в эксперименте (значение τ уменьшилось с $18,8 \cdot 10^{-13}$ с до $0,031 \cdot 10^{-13}$ с). Можно считать, что эта закономерность связана с уменьшением энергии, необходимой молекуле ортодихлорбензола для подъема с более низкого энергетического уровня на более высокий энергетический уровень. Ряд спектров КРС наблюдался также на более низких частотах (152, 202, 273, 341, 387, 484 см^{-1}), появление этих спектров связано с вращательно-качательным движением молекулы.

Таблица 1.

Физические величины, связанные с водородными связями, на основе теоретических расчетов для молекулы ортодихлорбензола

$\nu, \text{см}^{-1}$	$\tau_0, 10^{-14}\text{с}$	$U, \text{кДж/моль}$	$\tau, 10^{-13}\text{с}$
152	3,49	10,0	18,8
659	0,80	8,2	2,32
1038	0,51	5,0	0,408
1128	0,47	4,3	0,275
1574	0,33	3,0	0,113
3071	0,17	1,5	0,031

Четвертая глава диссертации называется «**Механизмы проявления спектров комбинационного рассеяния света и инфракрасного поглощения в углеводородах со сложными структурными органическими соединениями и квантово-химические расчеты на их основе**», в которой особое значение придается систематическому изучению соединений, молекулярная структура которых становится все более сложной, в которой закономерности межмолекулярного взаимодействия изучены с помощью спектров КРС и ИК поглощения, а экспериментальные результаты усовершенствованы с помощью квантово-химических расчетов.

Систематизация молекул ацетонитрил– $\text{C}_2\text{H}_3\text{N}$, диметилформамид (ДМФ) ($(\text{CH}_3)_2\text{NCOH}$), хинолин ($\text{C}_9\text{H}_7\text{N}$), химико-пространственное строение которых последовательно усложняется, имеет особое значение при изучении закономерностей формирования спектров КРС и ИК поглощения, что позволяет полностью изучить структуру и состав молекул. Анализ характера колебательных спектров в многоатомных молекулах считается

затруднительным. Потому что атомы участвуют одновременно в нескольких колебаниях.

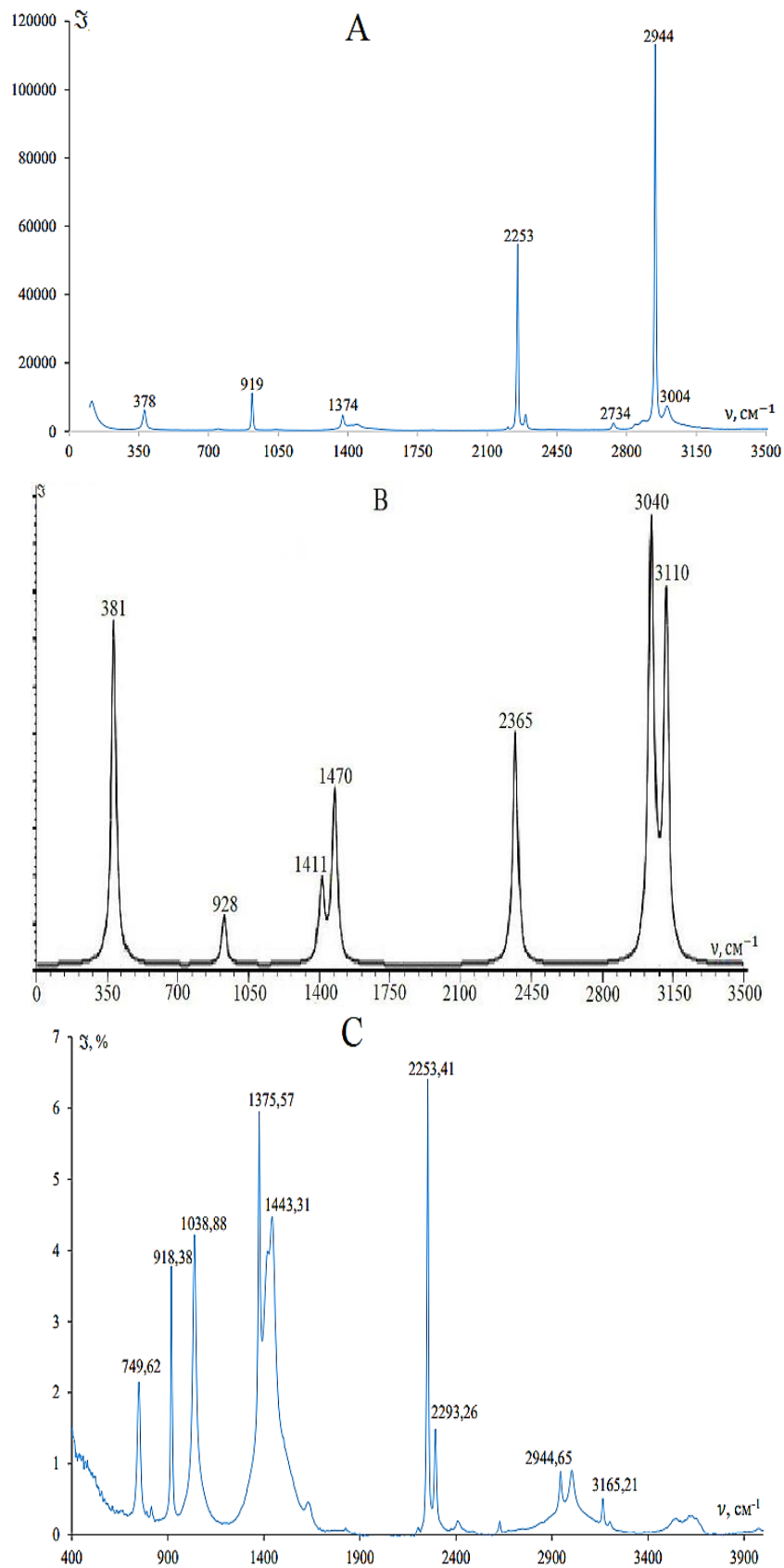


Рис. 4. Для молекулы ацетонитрила: А-спектр КРС полученный из эксперимента, Б-спектр КРС расчетный квантово-химическим методом, С-спектр ИК полученный из эксперимента

Движение атомов внутри молекулы — сложный процесс, и если нелинейная молекула состоит из N атомов, то число колебательных степеней свободы равно $3N-6$. Число колебательных степеней свободы равно числу собственных колебаний молекулы. Каждая из этих собственных колебаний имеют свою собственную частоту. Поглощение происходит в определенном диапазоне частот и формирует ИК-спектры.

На рис. 4 представлен общий вид спектра КРС в диапазоне частот 0-3500 см^{-1} и спектра ИК поглощения в диапазоне частот 400-4000 см^{-1} для молекулы ацетонитрила, а также в диссертации подробно описаны закономерности формирования спектров молекул ДМФ и хинолина.

Анализ закономерностей распределения частот КРС и ИК спектров показывает, что количество спектров КРС и ИК отличается друг от друга, а также различны абсолютные значения их интенсивностей. Как уже говорилось выше, интенсивность спектров КРС связана с изменением тензора поляризуемости молекулы, а в спектрах ИК - с изменением дипольного момента молекулы.

Рассмотрим спектральный интервал, связанный с колебанием С-Н спектра КРС. Это колебание может быть связано с колебаниями межмолекулярных Н-связей. Для молекулы ацетонитрила наблюдались 7 спектров, связанных с колебаниями С-Н, их частоты соответствуют значениям 378, 919, 1374, 2253, 2734, 2934, 2944, 3004 см^{-1} . Спектры КРС, соответствующие более низким частотам (378, 919 см^{-1}), связаны с вращательно – качательным движением ацетонитрила.

Таблица 2.

Значения частот и интенсивностей спектров КРС полученных из экспериментов и квантово-химических расчетов, для молекулы ацетонитрила

Эксперимент		Квантово-химических расчет	
$\nu, \text{см}^{-1}$	\mathfrak{I}	$\nu, \text{см}^{-1}$	\mathfrak{I}
378	6223	381	1252
919	11172	928	365
1374	4750	1470	645
2253	54796	2365	1695
2292	4937	2365	1695
2944	113155	3040	3150
3004	7427	3110	1320

Значения частот и интенсивностей спектров КРС, полученные в результате экспериментов и квантово-химических расчетов молекулы ацетонитрила, представлены в таблице 2. По данным таблицы 2 можно сказать, что значения спектра КРС, формируемого вращательно – колебательным движением ацетонитрила, рассчитанные экспериментальным и квантово-химическим методом, перекрываются в пределах погрешности эксперимента.

Значение высоты потенциального барьера (энергии активации молекулы) молекулы имеет большое значение при получении соответствующей информации о закономерностях колебательного движения молекул и

механизмах проявления спектров. Определить это количество энергии можно несколькими способами, а рассчитать его можно полуэмпирическим методом (формула 1). В принципе, можно считать, что высота потенциального барьера равна разности энергий, создаваемой за счет отталкивания молекул при взаимном колебании. Эта энергия пропорциональна энергии Н-связи, и ее значение можно определить с помощью квантово-химических расчетов.

С помощью квантово-химических расчетов на компьютере с помощью метода Хартри-Фока моделировалась электронная структура молекул HF/6 – 311G** (рис. 5), и были определены длины связей атомов (в Ангстремах, Å) и пространственные углы между ними.

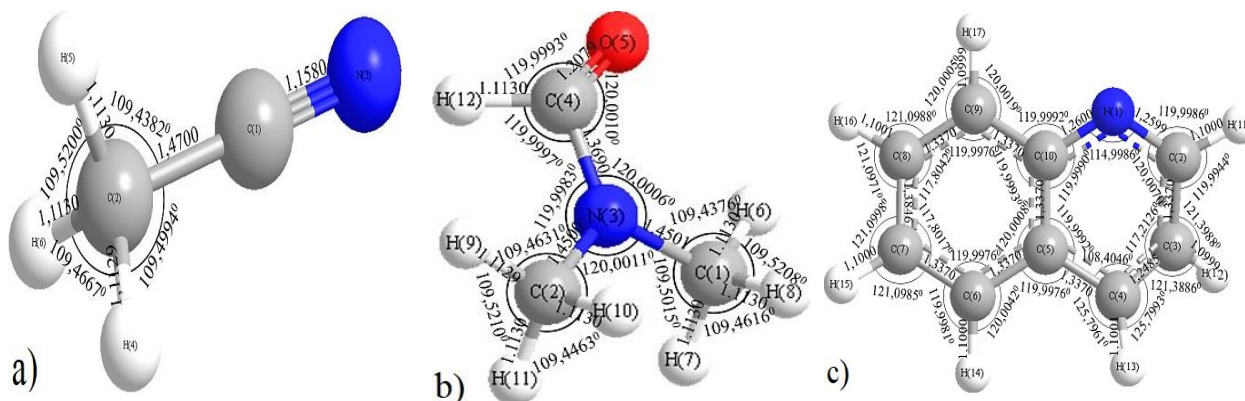


Рис. 5. Электронная структура, полученная на основе квантово-химических расчетов для молекул: а) Ацетонитрила б) ДМФ в) Хинолина

Результаты, полученные с помощью этого метода, позволяют определить, значение высоты потенциального барьера молекулы по формуле 1, исходя из значений расстояний и углов между атомами в молекулах. Эта энергия пропорциональна энергии Н-связи, и зная ее значение, был рассчитан ряд микроскопических параметров, связанных с водородной связью.

На примере молекулы ацетонитрила рассчитаны время колебаний молекулы и время жизни Н-связи для частот разных спектра КРС (рис. 6 и 7).

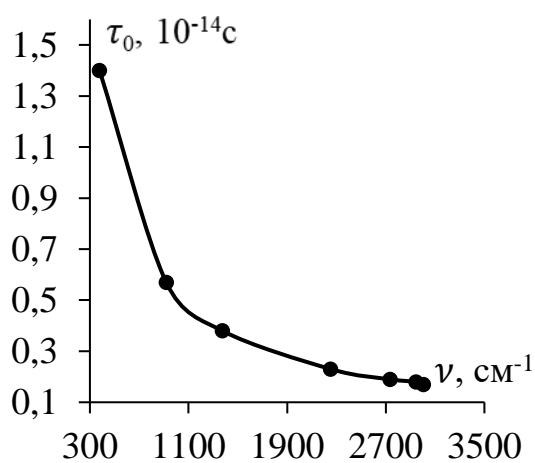


Рис.6. Зависимость времени колебаний молекулы ацетонитрила от частоты колебаний

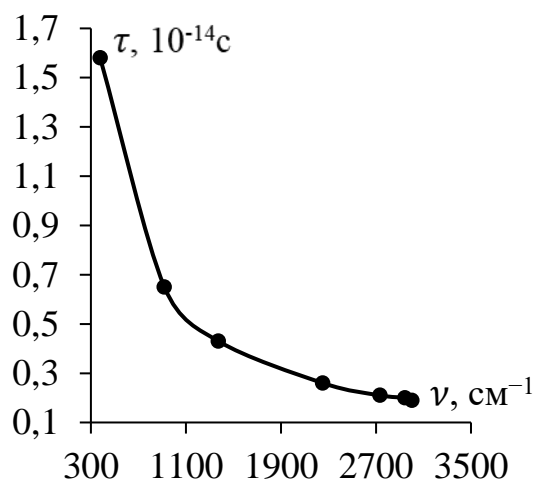


Рис.7. Зависимость времени жизни Н-связи для молекулы ацетонитрила от частоты колебаний

Анализ рисунков 6-7 показывает, что период колебаний (время колебаний) молекулы ацетонитрила, находящейся на нижнем энергетическом уровне, уменьшается с увеличением частоты колебаний.

По мере увеличения частоты колебаний молекулы, соответствующей максимальным значениям интенсивности спектра КРС, наблюдаемым в эксперименте, время пребывания колебаний, связанных с Н-связью молекулы ацетонитрила, уменьшается. В частности, оно уменьшилось с $1,58 \times 10^{-14}$ с до $0,19 \times 10^{-14}$ с.

Согласно закономерностям ИК-спектров, колебание молекулы в валентном колебании вызывает изменение расстояния между атомами в направлении связи между атомами. При деформационном колебании расстояние между атомами остается постоянным, в результате чего углы между атомами изменяются. В частности, частоты валентных колебаний, связанных с Н-связью, в спектрах КРС и ИК поглощения молекулы ацетонитрила отличаются друг от друга. Например, спектр, соответствующий значению 1374 см^{-1} в спектре КРС равен $1375,57 \text{ см}^{-1}$ в ИК-спектре и смещён на $1,57 \text{ см}^{-1}$. Ввиду того, что эта разница в спектрах КРС и ИК поглощения невелика, можно сделать вывод, что Н-связи имеют однородную и стабильную структуру. Интенсивности спектров резко отличаются друг от друга, причем интенсивность ИК-спектра в несколько раз превышает интенсивность спектра КРС. Следовательно, ИК-спектр активен и связан с изменением дипольного момента молекулы.

Определены особенности роля Н-связей в проявлении спектра КРС в молекулах, с использованием экспериментально определенного спектра КРС определены время жизни, энергия Н-связи, а также время, характеризующее частоту колебания молекул и был рекомендован метод их теоретического расчета. В ИК-спектре отмечено, что помимо Н-связи также отчетливо проявляются эффекты валентных и деформационных колебаний.

ВЫВОДЫ

Подробный анализ результатов, полученных при проведении эксперимента и теоретических расчетов в диссертационной работе, позволил сделать следующие выводы:

1. Впервые проанализированы механизмы проявления оптических спектров, характеризующих закономерности релаксационных процессов, происходящих на энергетических уровнях атомов и молекул в объекте исследования лазерного излучения, и установлено, что природа КРС и ИК-спектров различна. В частности, было замечено различие в интенсивности этих спектров и в их частотном распределении. Установлено, что закономерности проявления спектра КРС связаны с изменением тензора поляризуемости молекул, а в спектре ИК - с изменением дипольного момента молекул.

2. Впервые даны научно обоснованные рекомендации, основанные на анализе механизмов формирования спектров КРС и ИК в симметричных и

асимметричных объектах исследования по тензору поляризуемости. В частности, теоретически рассчитано время пребывания водородных связей τ ($\sim 10^{-13}$ с) для молекул с Н-связями, связанными с взаимодействием молекул с лазерным излучением, и замечено, что время жизни Н-связей уменьшается по мере увеличения частоты колебаний молекул. Этот закон связан с уменьшением энергии активации, необходимой молекулам для подъема с более низкого энергетического уровня на более высокий энергетический уровень, и позволил сделать научные выводы на основе анализа результатов исследований. Рекомендован метод определения ряда молекулярных параметров (τ, τ_0, U и др.), связанных с закономерностями колебания молекул.

3. С использованием порядка расположения атомов в молекулах, принадлежащих объектам исследования, моделируя в компьютере с помощью метода Хартри-Фока проведены квантово-химические расчеты и создана структурная модель молекул. Даны рекомендации по определению длин межатомных связей в молекуле и углов между ними, а также разработана методика теоретического расчета частотного распределения спектра КРС. Обнаружено, что число спектров КРС, полученных на основе теоретических расчётов при помощи такого метода почти совпадают с экспериментально полученным числом спектров КРС по распределению частот в пределах погрешности эксперимента.

4. Впервые отмечено, что изменение в частотном распределении спектров КРС, формируемых колебательным движением в молекулах со связями С-Н и С-Cl, например, молекулы ортодихлорбензола, происходит со сложной закономерностью. Сравнительно большие значения интенсивностей в спектрах КРС, соответствующие 152, 659, 1038, 1128, 1574, 3071 см^{-1} , могут быть причиной того, что они связаны с колебаниями С-Н с Н-связью. Н-связи имеют межмолекулярные взаимодействия, связанные с донорно-акцепторными $n - \sigma$ электронными связями, и могут даже вызывать изменения в структуре взаимодействующих молекул.

5. Результаты квантово-химических расчетов, проведенных на объектах исследования, были рекомендованы для синтеза конкретных химических веществ, для теоретического расчета значений тензора поляризуемости по степеням свободы молекул.

6. Результаты исследований служат для определения влияния структурных изменений молекул на КРС и ИК спектров при присоединении легких и тяжелых атомов (О, Н, Cl, N и др.) к структуре многоатомных углеводородов, а также для разработки молекулярных теорий, отражающих закономерности релаксационных процессов на энергетических уровнях.

**SCIENTIFIC COUNCIL ON AWARD OF THE SCIENTIFIC DEGREES
OF DOCTOR OF PHILOSOPHY PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 AT THE
SAMARKAND STATE UNIVERSITY NAMED AFTER
SHAROF RASHIDOV**

NATIONAL UNIVERSITY OF UZBEKISTAN

ALLAKULIEVA SHAKHLOXON KHAKIMBAY QIZI

**RELAXATION PROCESSES IN CONDENSED MATTERS AND THEIR
MANIFESTATION IN THE SPECTRUM OF COMBINATION LIGHT
SCATTERING**

01.04.05 – Optics

**DISSERTATION ABSTRACT
of the Doctor of Philosophy (PhD) on Physical and Mathematical Sciences**

Samarkand – 2024

The theme of dissertation of doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences was registered by the Supreme Attestation Commission at the Ministry of Higher Education, Science and Innovation of the Republic of Uzbekistan under № B2022.2.PhD/FM722.

Dissertation has been prepared at the National university of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek. The abstract of the dissertation is posted in three languages (uzbek, russian, english (resume)) on the website (www.samdu.uz) and the “Ziyonet” information and educational portal (www.ziyonet.uz).

Scientific supervisor: **Otajonov Shavkat**
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

Official opponents: **Khushvaqtov Khakim Abdulkhaqovich**
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

Rakhmatullaev Ilyos Arzimurodovich
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Docent

Leading organization: **Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A.Arifov**

Dissertation defense will be held on « ____ » _____ 2024 at ____ at the meeting of Scientific Council number PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 at Samarkand State University named after Sh.Rashidov. (Address: University Boulevard 15, Samarkand, 140104, Uzbekistan, Ph.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; fax: (99866) 239-11-40; e-mail: rektor@samdu.uz. cabinet 63, ground floor, the Engineering Physics Institute, Samarkand State University named after Sh.Rashidov).

Dissertation is possible to review in Information Resource Centre at Samarkand State University named after Sh.Rashidov (is registered № ____) (Address: University Boulevard 15, Samarkand, 140104, Uzbekistan, Ph.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; fax: (99866) 239-11-40.

Abstract of dissertation sent out on « ____ » _____ 2024 year
(Registry record № _____ on « ____ » _____ 2024 year)

M.Kh.Ashurov
Chairman of scientific council
on award of scientific degrees,
DSc in physics and mathematics, academician

R.M.Radjabov
Scientific secretary of scientific council
on award of scientific degrees,
CSc in physics and mathematics, docent

D.I.Semenov
Chairman of scientific seminar under scientific
council on award of scientific degrees,
DSc in physics and mathematics, docent

INTRODUCTION (abstract of PhD dissertation)

The aim of the research. Consists of researching, using optical spectra, the patterns of relaxation processes associated with the vibrational and rotational motion of polyatomic hydrocarbon molecules, symmetrical and asymmetrical on the polarizability tensor, under the influence of laser radiation.

The object of the research were selected molecules whose structure goes from simple to complex, consisting of 7 hydrocarbons.

The subject of research is to study the properties of molecules that are symmetric and asymmetric according to the polarizability tensor, the nature of absorption and radiation processes at energy levels, and the influence of intermolecular interactions on optical spectra.

The scientific novelty of the research is as follows:

a methodology for determining the lifetime of H-bonds associated with the interaction of molecules under the influence of electromagnetic wave radiation was developed;

for the first time, the lifetime of the H-bond was calculated based on the combination scattering spectrum, and it was found that the lifetime of this bond decreases as the vibration frequency of the molecule increases;

based on the obtained results, quantum-chemical calculations were carried out, a structural model of molecules was created, and practical recommendations were given for determining the bond lengths of atoms and the angles between them;

for the first time, based on the comparison of infrared spectra with the combination scattering spectrum of light obtained from the experiment, the share of molecules in the spectrum resulting in the change of polarizability tensor or dipole moment was determined;

the influence of the laws of vibrations of various atoms included in the structure of benzene on combination scattering of light, as well as on the manifestation of infrared spectra, was studied, it was discovered that the manifestation of spectra associated with the movement of molecules consisting of closely spaced atoms is associated with deformation vibrations;

the laws of connection of the combination scattering of light and the manifestation of infrared spectra with the types of vibrations were developed.

Implementation of research results. Based on the scientific results of researching the laws of relaxation processes associated with the vibrational motion of molecules in hydrocarbons selected as the object of research:

scientific results related to the change of the polarizability tensor and dipole moment of the molecule as a result of a mutual comparison of the combination scattering of light and infrared spectra, number REP-04032022-206 “Management of the processes of optical harmonic generation and soliton propagation in optoelectronic networks” (2022-2024) was used in the development of models of propagation of optical solitons in low-dimensional optical materials, as well as experimental methods of converting the frequency of mid-infrared laser radiation into optical harmonics in metal nanostructured tiles (Reference No. 01/261 of Chirchik State Pedagogical University of February 5, 2024);

the laws of H-bonding between atoms based on experiments and theoretical calculations, as well as the results of determining the lifetime of this bond, number FZ-20200929385 “Development of spectroscopic and nonempyric analysis methods for the study and application of nanoscale molecular clusters of biological objects” (2022-2027) in the fundamental project of the state scientific and technical program, which allowed to determine the mechanisms of molecular clustering processes (Reference No. 10-2254 of Samarkand State University named after Sh.Rashidov of May 15, 2024);

the results of the research are reflected in the working curriculum and calendar plan of the special course “Classical and modern foundations of molecular optics” for students of the Master’s specialty 70530901 - Physics (by majors) at the Department of Photonics, Faculty of Physics of the National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulug‘bek has been achieved, laws related to the change of polarizability tensor and dipole moments of molecules in the manifestation of spectra combination scattering of light and infrared, the methodology of determining the main molecular parameters of relaxation processes at energy levels, and other laws have been developed, served to enrich the classes with modern experimental and theoretical calculated results (Reference No. 04/11-4483 of the National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulug‘bek of May 23, 2024);

Approbation of the research results. Results of the research work have been discussed at 5 international and 5 republican scientific-practical conferences.

Publication of research results. A total of 15 scientific works on the topic of research, including 5 articles in scientific publications recommended to publish the main scientific results of the Doctor of Philosophy (PhD) dissertation of the Higher attestation commission of the Republic of Uzbekistan (including 2 of the republic scale, 2 in the Scopus database and 1 in the international Web of Science journals) were published.

The structure and volume of the dissertation. The dissertation consists of an introduction, four chapters, a conclusion and a list of used literature. The volume of the dissertation includes 127 pages, 45 figures, 24 tables.

E'LON QILINGAN ISHLAR RO'YXATI
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I bo'lim (I часть; I part)

1. Otajonov Sh., Allaquliyeva Sh., Eshchanov B., Abdullayev N., Eshkuvatov H.. Manifestation of the laws of vibrational motion of molecules of the condensed medium under the influence of laser radiation in the Raman spectrum // Results in Optics, 2023, Vol. 13, 100550. <https://doi.org/10.1016/j.rio.2023.100550> (01.00.00; №3) (Scopus)

2. Eshchanov B., Otajonov Sh., Mukhamedov G., Doroshenko I., Karpova O., Allakuliyeva Sh. Experimental study of Raman spectra of some aromatic hydrocarbons // Ukrainian Journal of Physics, 2020, Vol.65, No.4. – pp. 284-290. <https://doi.org/10.15407/ujpe65.4.284>. (01.00.00; №51) (Scopus)

3. Allaquliyeva Sh., Otajonov Sh., Eshchanov B. Lazer nurlanishi ta'sirida kondensirlangan muhit molekulasining tebranma harakat qonuniyatlarini yorug'likning kombinatsion sochilish spektrida namoyon bo'lishi // Ilm sarchashmalari ilmiy-nazariy, metodik jurnali, 2022, № 12. – pp. 16-19. (01.00.00; №12)

4. Аллақулиева Ш., Отажонов Ш., Эшчанов Б. Конденсирланган мухитларнинг структуравий ва оптик хоссаларини спектроскопик метод билан тадқиқ қилиш // Ўзбекистон Республикаси Фанлар академиясининг маърузалари (Доклады АНРУз) журнали, “Фан” нашриёти, Тошкент, 2023, № 1. – pp. 14-19. (01.00.00; №7)

5. Allaquliyeva Sh., Otajonov Sh., Eshchanov B.. Study of vibrational motion laws of acetonitrile molecule by combination scattering and infrared spectroscopy methods // TELEMATIQUE, 2023, Vol. 22, No. 1. – pp. 2463-2469. https://papers.ssrn.com/sol3/papers.cfm?abstract_id=4442235. (01.00.00; №1) (Web of Science)

II bo'lim (II часть; II part)

6. Otajonov Sh., Eshchanov B., Allaquliyeva Sh., Xudoyberdiyeva D.. Suyuqlik molekularining tebranma harakat dinamikasi: molekulararo o'zaro ta'sirlashuvni Raman spektrlarida namoyon bo'lishi // “Kondensirlangan muhit fizikasining rivojlanish istiqbollari” Xalqaro ilmiy va ilmiy-texnik anjuman materiallar to'plami, Qarshi, 2022. – pp. 33-36.

7. Отажонов Ш., Эшчанов Б., Аллақулиева Ш., Худойбердиева Д.. Проявление вращательных качаний в строение конденсированных систем // Международная конференция на тему «Роль физики в развитии науки, просвещения и инновации» посвященная «Двадцатилетию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 годы)» материалы, Душанбе, Тожикистон, 2022. – pp. 53-56.

8. Аллақулиева Ш. Ҳ.. Диоксан молекуласининг тебранма ҳаракат қонуниятларини спектроскопик усул билан тадқиқ қилиш // “Современные тенденции развития физики полупроводников: достижения, проблемы и перспективы” сборник материалов II международной научной конференции, Ташкент, 2022. – pp. 408-409.

9. Allaquliyeva Sh., Otajonov Sh., Mannonova F.. Xinolin molekulasining tebranma harakat qonuniyatlarini yorug'likning kombinatsion sochilish va infraqizil yutilish spektrlarida namoyon bo'lishi // “Kondensirlangan muhit fizikasining rivojlanish tendensiyalari” Xalqaro ilmiy anjuman materiallar to'plami, Farg'ona davlat universiteti, 2023, – pp. 96-99.

10. Отажонов Ш., Эшчанов Б., Аллақулиева Ш., Худойбердиева Д.. Квант-кимёвий ҳисоблашларни молекуланинг электрон тузилиши ва спектроскопик параметрларни аниқлашга қўллаш // “Физиканинг ривожда фундаментал-инновацион тадқиқотлар ва унинг истиқболлари” Республика илмий-амалий конференцияси материаллар тўплами, Ўзбекистон Миллий университети, Ташкент, 2022. – pp. 11-12.

11. Аллақулиева Ш., Отажонов Ш.. Молекулаларнинг ҳаракати билан боғлиқ релаксацион жараёнларни спектроскопик метод билан тадқиқ қилиш // “Оптика ва лазер физикасининг муаммо ва истиқболлари” номли Республика илмий-амалий конференция тўплами, Ўзбекистон Республикаси Фанлар Академияси У.А. Арифов номидаги ион-плазма ва лазер технологиялари институти, Тошкент, 2023, – pp. 7-8.

12. Аллақулиева Ш., Отажонов Ш., Эшчанов Б.. Ацетонитрил молекуласининг тебранма ҳаракат қонуниятларини спектроскопик методлар билан тадқиқ қилиш // “Сифатли таълим – тараққиёт пойдевори” номли Республика илмий-амалий анжумани материаллар тўплами, Ўзбекистон Миллий университети, Тошкент, 2023. – pp. 86-90.

13. Аллақулиева Ш. Ҳ.. Спектроскопик усул билан диметилформаид молекуласи таркибидаги атомларнинг тебранма ҳаракат қонуниятларини тадқиқ қилиш // “Физика фанининг ривожда истеъдодли ёшларнинг ўрни” (РИАК-16) Республика илмий-амалий конференцияси (РИАК-XVI-2023) материаллари тўплами, Тошкент, 2023, – pp. 21-24.

14. Mannonova F., Allaquliyeva Sh., Xudoyberdiyeva D., Otajonov Sh., Eshchanov B. Etilbenzol molekulasining tebranma harakat qonuniyatlarini yorug'likning kombinatsion sochilish spektri yordamida tadqiq qilish // “Fizika fanining rivojida iste'dodli yoshlarning o'rni” Respublika ilmiy-amaliy konferensiyasi (RIAK-XVII-2024) materiallari to'plami, Toshkent, 2024, – pp. 273-276.

15. Аллақулиева Ш., Отажонов Ш.. Қутбланувчанлик тензори бўйича симметрик бўлган циклогексан молекуласининг тебранма ҳаракат қонуниятларини ёруғликнинг комбинацион сочилиш спектрида намоён бўлиши // “Физикада фундаментал ва амалий тадқиқотлар” халқаро илмий анжуман материаллар тўплами, Тошкент, 2024, – pp. 16-18.

Avtoreferat Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universitetining
“Ilmiy axborotnoma” jurnali tahririyatida tahrirdan o‘tkazilidi (14.10.2024-yil).

Bosmaxona tasdiqnomasi:



4268

2024-yil 15-oktabrda bosishga ruxsat etildi:
Ofset bosma qog‘ozi. Qog‘oz bichimi 60x84_{1/16}.
“Times new roman” garniturasini. Ofset bosma usuli.
Hisob-nashriyot t.: 2,8. Shartli b.t. 2,3.
Adadi 100 nusxa. Buyurtma №17/10.

SamDCHTI tahrir-nashriyot bo‘limida chop etildi.
Manzil: 140104, Samarqand sh., Bo‘stonsaroy ko‘chasi, 93.